

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA
CURSO DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA

*Estudo de Esquemas de Alta Resolução em
Algoritmos Simultâneos e Seqüenciais*

DISSERTAÇÃO SUBMETIDA À UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA
CATARINA PARA OBTENÇÃO DO GRAU DE MESTRE EM ENGENHARIA

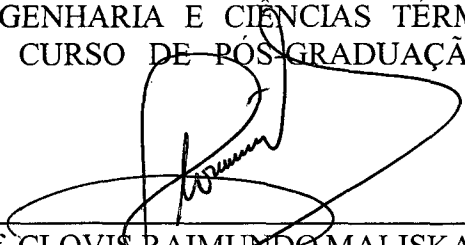
LUIZ AUGUSTO PRETTI DE MENEZES

FLORIANÓPOLIS, ABRIL DE 1996

**ESTUDO DE ESQUEMAS DE ALTA RESOLUÇÃO EM
ALGORITMOS SIMULTÂNEOS E SEQUENCIAIS**

LUIZ AUGUSTO PRETTI DE MENEZES

ESTA DISSERTAÇÃO FOI JULGADA ADEQUADA PARA A OBTENÇÃO DO
TÍTULO DE **MESTRE EM ENGENHARIA** ESPECIALIDADE ENGENHARIA
MECÂNICA, ÁREA DE CONCENTRAÇÃO ENGENHARIA E CIÊNCIAS TÉRMICAS,
APROVADA EM SUA FORMA FINAL PELO CURSO DE PÓS-GRADUAÇÃO EM
ENGENHARIA MECÂNICA.



Prof. CLOVIS RAIMUNDO MALISKA, Ph.D.
ORIENTADOR



Prof. ANTÔNIO FÁBIO CARVALHO DA SILVA, Dr. Eng. Mec.
COORDENADOR DO CURSO

BANCA EXAMINADORA



Prof. ANTÔNIO FÁBIO CARVALHO DA SILVA, Dr. Eng. Mec.



Prof. SÉRGIO PETERS, Dr. Eng. Mec.



Prof. CÉSAR JOSÉ DESCHAMPS, Ph.D.



Prof. CARLOS HENRIQUE MARCHI, M. Eng. Mec.

*Dedico este trabalho a meu tinga, minha mãe,
Silvio, Lucia e Lucas*

AGRADECIMENTOS

Ao CNPq pelo suporte financeiro.

Ao CPGEM que me apoiou na execução deste trabalho.

Ao Prof. Maliska pela orientação e paciência que permitiram a conclusão deste trabalho.

Ao Prof. Sérgio Peters pela troca de idéias a respeito de funções de interpolação.

Ao Prof. Deschamps pelas discussões sobre esquemas NVD e pelo cessão do código, que foi decisivo para verificação das subrotinas do NVD.

Ao Eng. Diomar C. Lobão pela atenção e esclarecimentos dados na minha passagem pelo CTA.

Ao Prof. Carlos H. Marchi pela amizade, cessão dos códigos unidimensionais e apoio dados para conclusão desse trabalho.

Ao Prof. Luis A. Scola pelo código usado nos testes dos esquemas NVD e amizade.

Aos amigos Luciano A. Santos e Adalberto R. Cunha pelas inúmeras horas de “filosofia” sobre os métodos numéricos de onde pude extrair ótimas idéias utilizadas neste trabalho.

Aos amigos Marcos Livramento e Clovis Maliska Jr. pelo apoio que me deram no período que estive em Salvador e as inúmeras instalações de programas que fizeram a meu pedido.

A todos os colegas do SINMEC pelo excelente ambiente de trabalho.

Aos colegas de república que participaram dos bons e maus momentos desta jornada.

Ao casal Carlos Almir e Ana Paula pela amizade e companheirismo.

À Fundação Escola Politécnica, Depto. Eng. Química, e Lab. de Energia da UFBA.

Ao Sr. Danilo e Sra. Rosa Rupp, Melissa, Carla, Daniela e Juliana que foram uma segunda família para mim, quando cheguei em Florianópolis.

À Marla Cristina Matos pelo apoio e carinho.

Ao Sr. Gilvam e Sra. Suzana D’Amorim e Eurico pelas calorosas acolhidas que me proporcionaram nas minhas várias passagens pelo Rio de Janeiro.

A todos que acreditaram no meu trabalho.

ÍNDICE

Resumo	vii
Abstract	viii
Lista de Figuras	ix
Lista de Tabelas	xii
Simbologia	xiii
1 Introdução	1
1.1 Um Breve Histórico	1
1.2 Revisão Bibliográfica	2
1.3 Escopo do Trabalho	9
2 Aspectos Matemáticos	10
2.1 Leis de Conservação Hiperbólicas	10
2.2 Esquemas Numéricos Conservativos	14
2.3 Esquemas Monótonos	15
3 Dissipação e Oscilação Numérica	17
3.1 Esquema UDS	18
3.2 Esquema de Diferenças Centrais	20
3.3 Esquema Lax-Friedrichs	21
3.4 Esquema Lax-Wendroff	22
3.4.1 Esquema de Richtmyer e Morton	25
3.4.2 Esquema de MacCormack	25
3.5 Esquema de Warming e Beam	27
3.6 Esquema de Dissipação Artificial de Jameson	28
3.7 Esquema de Interpolação Upwind	30
3.8 Esquema de Interpolação Upwind de Segunda Ordem	31
3.9 Esquema de Interpolação QUICK	33
3.10 Esquemas Híbridos de Interpolação	34
3.11 Algumas observações	36
4 Esquemas TVD	37
4.1 Construção de Esquemas TVD	37
4.2 Esquema TVD de Primeira Ordem	39
4.3 Esquema TVD via Fluxo Modificado	40
4.4 Esquema TVD via Limitador de Fluxo	42
4.5 Esquema TVD Simétrico	47
4.6 Extensão para Sistemas de Leis de Conservação	48
5 Esquemas de Interpolação NVD	52

5.1 A Normalização das Variáveis	53
5.2 Diagrama NVD	54
5.3 Região de Segunda Ordem para Limitadores NVD	56
5.4 Esquemas de Interpolação Limitados	59
5.4.1 QUICK-NVD	59
5.4.2 CUI-NVD	61
5.4.3 SMART	62
5.4.4 MUSCL	64
5.4.5 MINMOD	65
5.4.6 CLAM	67
5.4.7 OSHER	69
5.4.8 EULER	70
5.4.9 STOIC	72
5.4.10 Resumo dos Limitadores	74
6 Resultados e Discussões	75
6.1 Solução Simultânea	75
6.2 Solução Sequencial	84
6.2.1 Uniformização das Velocidades Características	92
6.3 Esquemas de Interpolação NVD - Cavidade Quadrada	99
7 Conclusões e Recomendações	106
7.1 Conclusões	106
7.2 Recomendações	106
Apêndice A - Soluções Numéricas	108
Referências Bibliográficas	116

RESUMO

Neste trabalho é feito um estudo sobre esquemas TVD (*Total Variation Diminishing*) de alta resolução e esquemas de interpolação obtidos a partir do diagrama NVD (*Normalized Variable Diagram*). Esses esquemas conseguem elevar a ordem do algoritmo numérico preservando a monotonicidade da solução.

Os esquemas de alta resolução foram desenvolvidos para o tratamento de descontinuidades que podem ocorrer nas soluções de leis de conservação hiperbólicas. Alguns dos principais aspectos matemáticos dessas leis como forma fraca, condição de Rankine-Hugoniot, condição de entropia, problema de Riemann, esquemas conservativos e monótonos são comentados.

Os principais esquemas numéricos utilizados no desenvolvimento dos esquemas de alta resolução são apresentados, comentados e testados na equação de Burgers inviscida. Alguns comentários sobre o comportamento predominantemente difusivo ou oscilatório desses esquemas são feitos em função da equação diferencial modificada. Os critérios gerais para construção de esquemas TVD são deduzidos. Três formas do esquema TVD são apresentadas para uma equação escalar: TVD via modificação do fluxo, TVD via limitador de fluxo e TVD simétrico. A extensão dos esquemas para sistemas de equações não-lineares é feita via abordagem sequencial e características locais (solução simultânea) para o problema clássico do tubo de choque, bocal divergente e convergente divergente. Os resultados são comparados entre si e com as soluções analíticas.

Esquemas de interpolação de alta resolução são apresentados sob a ótica dos esquemas NVD. Uma região NVD para esquemas de segunda ordem é apresentada num paralelo com a região TVD de segunda ordem onde se verifica pequena diferença entre elas. Diversos esquemas de interpolação são facilmente monotinizados. Os esquemas de interpolação NVD são testados para o problema clássico de convecção em cavidade quadrada. Os resultados são comparados entre si e com soluções *benchmark*.

ABSTRACT

This work reviews TVD (Total Variation Diminishing) high resolution schemes and interpolation schemes obtained through the NVD (Normalized Variable Diagram). These schemes can raise the numerical algorithm order while preserving monotonicity.

High resolution schemes were developed to deal with discontinuities that may appear in hyperbolic conservation laws solutions. Some of the mathematical issues concerning it, like: weak form and solutions, Rankine-Hugoniot condition, entropy condition, Riemann problem, conservative schemes and monotonicity are addressed.

The main numerical schemes used in the developing of the high resolution are stated, commented and tested for the linear transport and Burger's inviscid equation. Some comments about their mainly diffusive or oscillatory behaviour are made based on the modified differential equation. The basic criterion for the construction of TVD schemes are deduced. Three TVD schemes are presented for a scalar equation: modified flux TVD, flux limiter TVD and symmetric TVD schemes. The extension to systems of equations is taken via sequential approach and local characteristics (simultaneous approach), for the shock tube, divergent nozzle and convergent-divergent nozzle problem. The solutions are compared with analytical solutions and in between.

High resolution interpolation schemes with the NVD focus are presented. A second order NVD region for interpolation schemes is taken in a parallel to the second order TVD region, where few differences are found. Several interpolation schemes can be easily monotonicized. These NVD interpolation schemes are tested for the square cavity convection problem and the results are compared with benchmark solutions and in between.

LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1 - Linhas características. _____	11
Figura 2.2 - Onda de choque. _____	13
Figura 2.3 - Rarefação estacionária. _____	14
Figura 2.4 - Arranjo das variáveis no método de volumes finitos e diferença central. _____	15
Figura 3.1 - Comportamento dos esquemas numéricos de primeira ordem para eq. de advecção linear. _____	19
Figura 3.2 - Comportamento dos esquemas numéricos de primeira ordem para equação de Burgers. _____	22
Figura 3.3 - Comportamento dos esquemas de segunda ordem para equação de advecção linear. _____	24
Figura 3.4 - Comportamento dos esquemas de maior ordem para equação de Burgers. _____	27
Figura 3.5 - Esquema de interpolação upwind de segunda ordem , extrapolação linear. _____	32
Figura 3.6 - Perfil quadrático assumido pelo QUICK. _____	33
Figura 3.7 - Exemplo de avaliação da propriedade fora do intervalo formado pelas propriedades vizinhas. _____	34
Figura 4.1- Região TVD geral. _____	44
Figura 4.2 - Região TVD de segunda ordem. _____	45
Figura 5.1 - Representação das propriedades no plano físico. _____	53
Figura 5.2 - Representação das propriedades no plano normalizado. _____	54
Figura 5.3 - Região CBC no diagrama NVD. _____	55
Figura 5.4 - Relações entre variável normalizada e razão de gradientes ($u_n > 0$). _____	57
Figura 5.5 - Região geral CBC no plano $\phi \times r$. _____	58
Figura 5.6 - Região CBC de segunda ordem no plano $\phi \times r$. _____	58
Figura 5.7 - Diagrama NVD do QUICK monotonicizado. _____	60
Figura 5.8 - Limitador QUICK. _____	60
Figura 5.9 - CUI monotonicizado, diagrama NVD. _____	61
Figura 5.10 - Limitador CUI. _____	62
Figura 5.11 - Diagrama NVD do esquema SMART. _____	63
Figura 5.12 - Limitador SMART. _____	63
Figura 5.13 - Diagrama NVD do esquema MUSCL. _____	64
Figura 5.14 - Limitador MUSCL. _____	65
Figura 5.15 - Diagrama NVD do esquema MINMOD. _____	66
Figura 5.16 - Limitador MINMOD. _____	67
Figura 5.17 - Diagrama NVD do esquema CLAM. _____	68
Figura 5.18 - Limitador CLAM ou de Van Leer. _____	68
Figura 5.19 - Diagrama NVD do esquema de OSHER. _____	69
Figura 5.20 - Limitador OSHER. _____	70
Figura 5.21 - Diagrama NVD do esquema EULER. _____	71
Figura 5.22 - Limitador EULER. _____	72
Figura 5.23 - Diagrama NVD do esquema STOIC. _____	73

<i>Figura 5.24 - Limitador STOIC.</i>	73
<i>Figura 6.1 - Comparação dos perfis adimensionais de temperatura para diferentes esquemas tradicionais. Tubo de choque, caso 1.</i>	77
<i>Figura 6.2 - Comparação dos perfis adimensionais de densidade para diferentes esquemas tradicionais. Tubo de choque, caso 1.</i>	77
<i>Figura 6.3 - Comparação dos perfis adimensionais de pressão para diferentes esquemas tradicionais. Tubo de choque, caso 1.</i>	78
<i>Figura 6.4 - Comparação dos perfis adimensionais de entropia para diferentes esquemas tradicionais. Tubo de choque, caso 1.</i>	78
<i>Figura 6.5 - Comparação dos perfis adimensionais de temperatura para diferentes esquemas TVD via fluxo modificado. Tubo de choque, caso 1.</i>	80
<i>Figura 6.6 - Comparação dos perfis adimensionais de temperatura para diferentes esquemas TVD via limitador de fluxo. Tubo de Choque, caso 1.</i>	80
<i>Figura 6.7 - Comparação dos perfis adimensionais de temperatura para diferentes esquemas TVD simétricos. Tubo de choque, caso 1.</i>	81
<i>Figura 6.8 - Comparação dos perfis adimensionais de temperatura para esquemas TVD de diferentes categorias. Tubo de choque, caso 1.</i>	82
<i>Figura 6.9 - Comparação dos perfis adimensionais de densidade para esquemas TVD de diferentes categorias. Tubo de choque, caso 1.</i>	83
<i>Figura 6.10 - Comparação dos perfis adimensionais de pressão para esquemas TVD de diferentes categorias. Tubo de choque, caso 1.</i>	83
<i>Figura 6.11 - Comparação dos perfis de entropia para esquemas TVD de diferentes categorias. Tubo de choque, caso 1.</i>	84
<i>Figura 6.12 - Perfil de energia total no tubo de choque, caso 2 (tabela 6.1), obtido por Thakur e Shyy (1993), $\varepsilon = 0,2$ e $\lambda = 0,1$.</i>	85
<i>Figura 6.13 - Perfil de energia total no tubo de choque, caso 2 (tabela 6.1), obtido no presente trabalho para $\varepsilon = 0,2$.</i>	86
<i>Figura 6.14 - Perfil de temperatura ao longo do bocal divergente.</i>	87
<i>Figura 6.15 - Resíduo normalizado da quantidade de movimento linear no bocal divergente para solução seqüencial e simultânea.</i>	88
<i>Figura 6.16 - Erro de massa para esquemas TVD via fluxo modificado de 2ª ordem (Eq. 4.22) avaliado no nó e na face.</i>	90
<i>Figura 6.17 - Erro no balanço de massa para esquemas seqüenciais e simultâneos no bocal divergente avaliados nos nós.</i>	90
<i>Figura 6.18 - Perfil de entropia para esquemas seqüenciais e simultâneos no bocal divergente.</i>	91
<i>Figura 6.19 - Perfis de temperatura para o esquema TVD de fluxo modificado no bocal divergente.</i>	93
<i>Figura 6.20 - Resíduo da quantidade de movimento linear para esquema TVD de fluxo modificado seqüencial com velocidades características uniformizada e não-uniformizada no bocal divergente.</i>	93
<i>Figura 6.21 - Perfil de temperatura no bocal convergente-divergente para esquema TVD de fluxo modificado seqüencial. CFL = 0,4 e $\varepsilon = 0,4$.</i>	95
<i>Figura 6.22 - Resíduo da quantidade de movimento linear para esquema TVD de fluxo modificado seqüencial com velocidades características uniformizada e não-uniformizada no bocal convergente-divergente.</i>	96
<i>Figura 6.23 - Sensibilidade do esquema seqüencial de velocidades características não-uniformizadas ao parâmetro de correção de entropia ε, para o tubo de choque, CFL = 0,4 (caso 1).</i>	97

<i>Figura 6.24 - Sensibilidade do esquema seqüencial de velocidades características não-uniformizadas ao CFL para o tubo de choque, $\varepsilon = 0,4$ (caso 1).</i>	97
<i>Figura 6.25 - Sensibilidade do esquema seqüencial de velocidades características uniformizadas ao parâmetro de correção de entropia ε, para o tubo de choque, CFL = 0,4 (caso 1).</i>	98
<i>Figura 6.26 - Sensibilidade do esquema seqüencial de velocidades características uniformizadas ao CFL para o tubo de choque, $\varepsilon = 0,4$ (caso 1).</i>	98
<i>Figura 6.27 - Geometria da cavidade quadrada.</i>	100
<i>Figura 6.28 - Comparação dos esquemas de interpolação de baixa ordem para arranjo desencontrado e co-localizado com o FLUENT, Re = 1000.</i>	101
<i>Figura 6.29 - Comparação dos esquemas de interpolação de alta ordem baseados no QUICK para arranjo desencontrado e co-localizado com o FLUENT-QUICK, Re = 1000.</i>	102
<i>Figura 6.30 - Comparação dos esquemas de interpolação de alta ordem CLAM e EULER com o FLUENT-QUICK, Re = 1000.</i>	103
<i>Figura 6.31 - Comparação dos esquemas de interpolação de alta ordem OSHER, MUSCL e MINMOD e FLUENT upw. 2ª ordem, Re = 1000.</i>	103
<i>Figura 6.32 - Melhoria da solução numérica e a diminuição de malha para resultados semelhantes usando esquemas de interpolação NVD.</i>	104

LISTA DE TABELAS

<i>Tabela 4.1 - Casos particulares do esquema TVD de fluxo modificado.</i>	46
<i>Tabela 5.1- Representação dos esquemas de interpolação no plano físico e normalizado.</i>	54
<i>Tabela 5.2 - Limitadores para esquemas NVD.</i>	74
<i>Tabela 6.1 - Condições iniciais para os casos testes.</i>	76
<i>Tabela 6.2 - Condições de contorno para bocal divergente.</i>	87
<i>Tabela 6.3 - Condições de contorno para bocal convergente-divergente.</i>	94
<i>Tabela 6.4 - Valores das variáveis para o problema da cavidade quadrada.</i>	99
<i>Tabela 6.5 - Comparação do tempo de CPU entre os diversos esquemas de interpolação em malha 30x30.</i>	105
<i>Tabela A.1 - Soluções numéricas dos esquemas tradicionais testados no tubo de choque.</i>	108
<i>Tabela A.2 - Soluções numéricas dos esquemas TVD testados no tubo de choque.</i>	110
<i>Tabela A.3 - Soluções numéricas dos esquemas NVD testados na cavidade quadrada.</i>	114

SIMBOLOGIA

a	velocidade característica	Subscrito	
A	Matriz jacobiana do vetor de fluxo F	C	Central
C	Coefficientes para aplicação do critério TVD	D	<i>Downstream</i>
E	Energia total	e, j + ½	Face este
f	fluxo numérico	E, j + 1	Volume de controle a este
F	Vetor Fluxo	f	face
H	Entalpia total	L	Estado de referência à esquerda da face
L	Matriz dos autovetores à esquerda	num	numérico
m	Fluxo de massa	P, j	volume de controle elementar
M	Número de Mach	R	Estado de referência à direita da face
P	Pressão	U	<i>Upstream</i>
Pe	Número de Peclet	w, j - ½	Face oeste
r	Razão de gradientes	W, j - 1	Volume de controle a oeste
R	Matriz dos autovetores à direita	0	condição inicial
S	Velocidade de propagação de um choque, Área		
t	tempo	Letras Gregas	
TV	Variação Total	α	Coefficiente do termo advectivo da função de interpolação WUDS
u	componente da velocidade na direção x	β	Coefficiente do termo difusivo da função de interpolação WUDS
U	Vetor das propriedades conservativas	Γ	Coefficiente de difusão
x, y	coordenadas cartesianas	φ	Limitador de fluxo
Sobrescrito		λ	Razão Δt / Δx
k	k-ésima componente	Λ	Matriz dos autovalores
n	nível de tempo anterior	Δ _e φ	φ _E - φ _P
n + 1	nível de tempo atual	Δx	Comprimento do volume de controle
~	variável normalizada (NVD)	Δt	Intervalo de tempo
		v	Número de CFL
		ρ	Massa específica

ϕ	Propriedade conservada
ψ	Função viscosidade numérica
∇	Operador divergente
Θ	Função de suporte compacto
$\partial/\partial y$	Derivada parcial em relação a y

1 INTRODUÇÃO

1.1 Um Breve Histórico

O desenvolvimento da mecânica dos fluidos computacional (CFD) teve grande impulso com a evolução dos computadores. O custo computacional por cálculo nos últimos quarenta anos tem diminuído de um fator de 10 a cada oito anos (Anderson *et al.*, 1984). Para se ter uma idéia basta observar as medidas de avaliação de desempenho ao longo do século. No começo do século, quando ainda nem se pensava em computadores e os cálculos eram feitos à mão, falava-se em número de operações de três dígitos por semana (Richardson, 1910), enquanto que hoje se fala em Megaflops (milhões de operações de ponto flutuante por segundo) e Mips (milhares de instruções por segundo). A velocidade de processamento e capacidade de armazenamento que os computadores têm hoje não seria imaginável há vinte anos. Graças à evolução que houve, problemas cada vez maiores e mais complexos tornam-se possíveis de ser resolvidos. Essa tendência de evolução ainda não demonstra ter terminado e hoje equipamentos computacionais de uso domésticos possuem condições cada vez melhores de realizar simulações numéricas aumentando o alcance dessas técnicas.

O trabalho de Richardson (1910) pode ser considerado como o marco inicial do que hoje é conhecido como CFD (Anderson *et al.*, 1984, Cap.1) (Roache, 1976, Cap.1). Ele introduziu a solução numérica da equação de Laplace e da equação biarmônica por esquemas discretos e iterativos. Liebmann (1918) melhorou a convergência do esquema quando passou a utilizar os valores mais recentes das variáveis disponíveis no processo iterativo. Courant, Friedrichs e Lewy (1928) provaram a existência e unicidade para equações diferenciais parciais lineares elípticas e hiperbólicas discretizadas. O parâmetro CFL foi batizado em homenagem a esses três autores. A partir da década de 30, surgiram as primeiras soluções numéricas de escoamentos viscosos (Thom, 1933). Southwell (1946) introduziu um método de relaxação mais eficiente. Mais tarde Allen e Southwell (1955) resolveram um escoamento viscoso, incompressível ao redor de um cilindro com cálculos feitos a mão.

Na década de 50 percebe-se um número crescente de trabalhos em CFD. Desenvolvido durante a Segunda Guerra Mundial, inicialmente mantido como informação estratégica, o método de análise de estabilidade linear de Von Neumann (Von Neumann e Richtmyer, 1950), baseado em séries de Fourier, é até hoje uma importante ferramenta para investigação do comportamento dos erros numéricos. Frankel (1950) e Young (1954) introduziram o SOR (*Successive Overrelaxation*) e Peaceman e Rachford (1955) e Douglas e Rachford (1956) os esquemas ADI (*Alternated Direction Implicit*) até hoje também bastante usados.

Courant *et al.* (1952) procuraram, pela primeira vez, introduzir a física (sentido de propagação da informação) do problema na discretização das equações com o esquema que hoje se conhece como UDS (*Upstream Differencing Scheme*). Lax (1954) utilizou um esquema de diferença central acrescentado de uma dissipação artificial para estabilizá-lo. Tanto o esquema de Courant *et al.* (1952) e Lax (1954) possuem primeira ordem de precisão. Esquemas desta ordem têm a característica de amortecer soluções com fortes gradientes como é o caso das equações onde os termos convectivos são dominantes. As equações de Euler formam um caso limite onde a dissipação física é nula, suas soluções podem apresentar fortes descontinuidades como choques e descontinuidades de contato e por isso são muito usadas para desenvolvimento e teste de esquemas que procuram tratar termos convectivos. Maiores detalhes sobre os primeiros desenvolvimentos em CFD podem ser encontrados em Richtmyer e Morton (1967) e Roache (1976).

1.2 Revisão Bibliográfica

Para resolver um problema de mecânica dos fluidos, deve-se geralmente calcular campos de velocidade, pressão, densidade, temperatura e outros escalares. O carregamento aerodinâmico de um corpo, por exemplo, depende diretamente da qualidade do campo de pressão. Em uma série de casos, particularmente escoamentos transônicos e supersônicos sobre corpos delgados (Bortoli, 1995), os esquemas de primeira ordem mostram-se pouco satisfatórios, sendo cada vez mais generalizado em CFD o uso de esquemas de ordem superior nesses casos.

Lax (1954) apresentou um esquema centrado de primeira ordem. Nesse trabalho Lax mostrou que **um esquema de diferenças finitas, para captar corretamente a velocidade de propagação e intensidade de uma descontinuidade, deve ter as equações discretizadas na forma conservativa** (massa, quantidade de movimento linear e energia total). Lax e Wendroff (1960) demonstraram um importante teorema sobre a consistência dos esquemas conservativos, como será visto mais adiante no capítulo 2.

Lax e Wendroff (1960,1964) desenvolveram um dos primeiros esquemas de segunda ordem. A principal característica deste esquema é a discretização espacial e temporal simultânea para aumentar a ordem de precisão do esquema inicial de Lax (1954). Para problemas não-lineares o esquema possui muitas variantes, no entanto, todas se reduzem ao esquema original de Lax e Wendroff para problemas unidimensionais lineares, sendo assim considerados pertencentes à família de esquemas de Lax Wendroff (Hirsch, 1988, Cap.17). O esquema de MacCormack é a versão não-linear mais popular desta família. Ele consiste de um esquema de dois passos (*predictor and corrector*) onde não é preciso avaliar o jacobiano ($A \equiv \frac{\partial f}{\partial u}$). Lerat (1979, 1983) apresentou versões implícitas desse esquema.

Esquemas que usam discretizações independentes para tempo e espaço podem ser considerados como formadores de outra família (Hirsch, 1988, Cap.18). Enquanto que diferenças centrais é utilizada na discretização espacial, diferentes esquemas são utilizados na discretização temporal. Beam e Warming (1976) utilizaram um esquema trapezoidal implícito de segunda ordem enquanto que Jameson *et al.* (1981) utilizaram o método explícito Runge-Kutta de integração de quatro passos para obter segunda ordem no tempo. O esquema de diferença central quando aplicado na discretização de derivadas de ordem ímpar, como os termos convectivos, não possui estabilidade numérica (Leonard, 1979b) podendo causar o aparecimento de campos de pressão do tipo “*tabuleiro de xadrez*” (Patankar, 1980). Esta característica provoca o

aparecimento de oscilações espúrias em regiões de fortes gradientes sendo portanto necessário a adição de termos de dissipação artificial. Quando a convecção é dominante, o uso de dissipação artificial apenas para eliminar oscilações resulta em soluções amortecidas devido à quantidade de dissipação que precisa ser adicionada. Para se obter soluções precisas seria necessário o emprego de malhas extremamente refinadas que podem esbarrar na capacidade dos recursos computacionais e no tempo disponível.

A discretização centrada não leva em consideração o sentido de propagação das perturbações ao longo das linhas características, típicas de equações hiperbólicas. Os esquemas que levam isso em consideração formam a família dos esquemas *upwind*. O trabalho de Courant *et al.* (1952) pode ser considerado como o pioneiro dessa família. Foi, entretanto, no trabalho de Godunov (1959) que se introduziu as idéias fundamentais em que hoje se baseiam muitos esquemas de alta resolução (Harten e Osher, 1987). Nesse trabalho se apresentou um esquema que introduz na discretização informações a respeito da solução analítica do problema de Riemann local nas interfaces das células.

O esquema de Godunov (1959), de primeira ordem, consiste de três passos distintos (Hirsch, 1988, Cap.20): avaliação de uma distribuição uniforme no instante $n\Delta t$; solução exata do problema de Riemann local; avaliação da nova distribuição em $(n+1)\Delta t$. Apenas o segundo passo pode ser considerado físico, enquanto que os outros dois são de natureza puramente numérica (passos evolutivos). Parte da solução exata do problema de Riemann é perdido no processo de média dos passos evolutivos justificando então o uso de algoritmos aproximados (Roe, 1981a), mais rápidos de avaliar computacionalmente. Uma importante contribuição do trabalho de Godunov foi a prova de que **esquemas monótonos lineares só podem ser no máximo de primeira ordem**.

Outro esquema dessa família é o *flux vector splitting* (Steger e Warming, 1981), que possui um grau de menor de informação física na discretização ao levar em consideração apenas os sinais dos autovalores em cada equação característica.

Até então foi discutido apenas o método de diferenças finitas como técnica de discretização numérica das equações diferenciais parciais. Na década de 70 surgiu um novo método que por definição é baseado na formulação integral das leis de conservação na forma conservativa (McDonald, 1971), denominado **volumes finitos**. Nesse método o domínio físico é dividido geometricamente (malha) em partes menores denominadas **células**. Os **volumes de controle** são definidos de acordo com a configuração da malha (eles podem ou não coincidir com as células), neles as leis de conservação são integradas e o valor médio da variável dependente é armazenada num ponto discreto no seu interior, denominado **nó**. O método permite grande flexibilidade na definição da posição do nó em relação à célula, podendo este ser localizado no centro (*cell centered*) ou vértice (*cell vertex*). Os arranjos dos volumes de controle para cada variável dependente não precisam necessariamente ser os mesmos, sendo assim pode-se ter arranjos co-localizados (coincidentes) ou desencontrados. O uso do método de volumes finitos em malhas não-estruturadas, que possui boa capacidade de adaptação e refino local, tem recebido cada vez mais atenção (Prakash e Patankar, 1986; Schneider e Raw, 1986).

Após a integração das equações deve-se avaliar fluxos e derivadas nas fronteiras dos volumes de controle onde estas não são conhecidas. A forma conservativa garante que as avaliações sejam feitas de forma única. Assim, ao se fazer o somatório dos balanços dos fluxos locais de cada volume de controle recupera-se o balanço do fluxo global do domínio físico. Pode-se definir o fluxo de diferentes formas: com o uso de expansão em série de Taylor quando a malha for ortogonal e igualmente espaçada ou pela interpretação do fluxo como sendo o

transporte de uma variável dependente por um fluxo de massa ($f = \dot{m} \phi$). Nesse último caso deve-se de avaliar a variável dependente nas fronteiras do volume de controle e para isso se usam os chamados **esquemas de interpolação**. Esses esquemas não são propriamente funções de interpolação como definido no método de elementos finitos, mas um procedimento para se obter o valor da variável na fronteira do volume de controle. Algumas formulações desse método se confundem com formulações de outros métodos numéricos como diferenças finitas e elementos finitos demonstrando haver regiões comuns entre eles. Sua grande flexibilidade e forte apelo físico fizeram esse método bastante popular na engenharia. Maiores detalhes podem ser vistos em Patankar (1980) e Maliska (1995).

Quanto maior a ordem do esquema de interpolação maior será a ordem da solução numérica. Alguns esquemas de interpolação procuram introduzir a física do problema na discretização. O esquema UDS (Courant *et al.*, 1952) leva em conta o sentido do fluxo para avaliar a propriedade na face. Os esquemas híbridos de interpolação como o *Power Law* (Patankar, 1980) e WUDS (Raithby e Torrance, 1974) variam a ordem de precisão entre primeira e segunda ordem de acordo com a relação entre a convecção e a difusão, dada pelo número de Peclet local. Eles se baseiam na solução analítica de um problema convectivo-difusivo, unidimensional, sem o termo transiente, onde o UDS pode ser considerado um caso particular quando o problema for completamente dominado pelos termos convectivos. Suas soluções apresentam melhoras em relação ao UDS mas desaparecem quando a convecção passa a dominar o problema como é o caso das equações de Euler. Dessa forma também introduzem elevados níveis de dissipação numérica na região de fortes gradientes.

Apesar dos esquemas *upwind* introduzirem certa física na discretização, sua extensão direta para segunda ordem de precisão também leva ao surgimento de oscilações espúrias em regiões de fortes gradientes. A solução física das equações de Euler e Navier-Stokes demonstram que não há surgimento de extremos nas variáveis do escoamento, isso pode ser provado para casos unidimensionais. Fica claro, portanto, que isso se deve ao tratamento numérico das equações (Hirsch, 1988, Cap.21). Para isso é preciso se investigar os mecanismos de geração dessas oscilações para poder evitá-las.

Esquemas de interpolação de ordem mais elevada que possuem menor quantidade de dissipação numérica precisam de mais pontos na vizinhança da fronteira do volume de controle para serem avaliados. Uma forma desses esquemas seria assumir que a variável dependente possui uma distribuição polinomial ao longo das linhas coordenadas. Um dos mais interessantes foi proposto por Leonard (1979a). Ele assume uma distribuição quadrática utilizando um ponto a jusante e dois pontos a montante denominado QUICK (*Quadratic Upstream Interpolation for Convective Kinematics*). O esquema possui precisão de até terceira ordem e possui uma certa estabilidade devido ao seu caráter *upwind*. Hayase *et al.* (1992) propuseram modificações para otimizar o esquema original denominando-o QUICK consistente. Uma extensão do QUICK consistente para malhas não-uniformes pode ser encontrada em Peters (1994).

Outros esquemas de interpolação assumem diferentes polinômios como o *upwind* de segunda ordem (Warming e Beam, 1976). O QUICK, em particular, é largamente difundido entre os usuários do método de volumes finitos. Algumas versões desse esquema são encontradas em códigos comerciais (FLUENT, 1993). Esses esquemas também provocam oscilações em regiões de fortes gradientes pois polinômios de ordem maior que um irão obter na face um valor da variável fora da faixa determinada pelo valor das variáveis nos pontos vizinhos. Um bom esquema de interpolação deve manter as características dos esquemas de ordem maior e ficar dentro dessa faixa limitada.

Com a introdução do conceito de monotonicidade (Godunov, 1959) percebeu-se que a teoria linear restringia os esquemas à primeira ordem. Para se conseguir esquemas monótonos de ordem maior é preciso, portanto, fazer uso de teorias não-lineares nos esquemas numéricos. Esse conceito foi introduzido independentemente por Boris e Book (1973) e Van Leer (1973) na forma de limitadores. Esse último autor, numa série de trabalhos denominados “*Toward the Ultimate Conservative Difference Schemes*” (Van Leer, 1973, 1974, 1977a, 1977b, 1979) culminou numa versão monotonizada de segunda ordem de precisão do esquema de Godunov (1959). Este esquema conhecido como MUSCL (*Monotonic Upstream-centered Scheme for Conservation Laws*) foi obtido com a modificação do primeiro passo evolutivo para uma distribuição linear com uma limitação da inclinação de forma que não surgissem oscilações. Fica claro ao final desses trabalhos que em esquemas de ordem maior é preciso que a evolução da variável seja limitada (*bounded*). Os esquemas obtidos desse modo são verdadeiramente não-lineares, i.e., são não-lineares mesmo quando aplicados a problemas lineares.

Harten (1983) num trabalho fundamental introduziu o conceito de TVD (*Total Variation Diminishing*). Originalmente batizado de TVNI (*Total Variation Non Increasing*), este conceito, mais geral do que o conceito de monotonicidade linear, pode ser aplicado a esquemas de ordem maior. Assim como o conceito de monotonicidade linear ele garante a convergência do esquema quando $\Delta x \rightarrow 0$ e previne o aparecimento de oscilações. O TVD, no entanto, não atende automaticamente à condição de entropia, por isso é preciso inserir algum mecanismo externo que garanta que ela seja satisfeita. Nos esquemas monótonos lineares o atendimento à essa condição pode ser facilmente verificada pela análise da equação diferencial modificada. Nela pode-se observar a presença de erros de truncamento na forma de dissipação numérica. A condição de entropia foi apresentada matematicamente por Lax (1973).

Esses novos esquemas são conhecidos como **esquemas de alta resolução** e apresentam as seguintes características:

- São no mínimo de segunda ordem de precisão, na análise do erro de truncamento, em regiões suaves.
- Não produzem oscilações espúrias nas regiões de fortes gradientes.
- Atendem critérios de convergência.
- A solução convergida é fisicamente consistente (atende a condição de entropia).

As teorias usadas para solução de leis de conservação não-lineares foram desenvolvidas a partir de equações lineares, escalares não-lineares ou sistemas de equações lineares unidimensionais. A extensão dos métodos escalares para sistemas não-lineares implica em assumir certos modelos físicos ou linearizações locais. Ainda hoje há pouco desenvolvimento sobre sistemas não-lineares e problemas com mais de uma dimensão. Os métodos de extensão são denominados Riemann *solvers*. Um estudo de diferentes Riemann *solvers* pode ser encontrado em Yee (1987a).

No trabalho de Harten (1983) são apresentadas as condições a serem impostas nos coeficientes de uma equação de conservação hiperbólica, escrita na formulação delta, suficientes para que o esquema seja TVD. Usando, inicialmente, um esquema explícito de primeira ordem ele propõe uma modificação no fluxo numérico para que fosse obtida segunda ordem de precisão. Essa modificação no fluxo não altera os limites de estabilidade obtidos do esquema inicial de primeira ordem. O esquema foi estendido para as equações de Euler via *solvers* de Riemann aproximados (Roe, 1981a; Harten, 1983; LeVeque, 1990, Cap.14). Essa forma de se

obter segunda ordem de precisão caracteriza a categoria dos **esquemas TVD via fluxo modificado**. Harten (1984) estendeu o esquema para problemas implícitos. Yee *et al.* (1985) melhoraram o esquema para problemas de regime permanente utilizando uma forma não conservativa de linearização (LNI), já que para estes casos não se deseja conservação antes de se atingir o regime permanente conseguindo-se assim aumentar a estabilidade desse esquema.

Sweby (1984, 1985) aplicou o conceito de TVD no esquema original Lax Wendroff escrito na forma de um esquema *upwind* acrescido de um fluxo antidifusivo, não limitado, para fazer um estudo esquemático sobre limitadores de fluxo. Os limites desses limitadores são deduzidos a partir das condições impostas nos coeficientes para que o esquema seja TVD (Harten, 1983). Como resultado desse trabalho é obtido uma nova categoria denominada de **esquemas TVD via limitador de fluxo**. Essa categoria reúne sobre uma mesma teoria diferentes esquemas independentes que já utilizavam algum tipo de limitador para obter alta resolução (Van Leer, 1974; Roe, 1981b; Chakravarthy e Osher, 1983).

Nos esquemas TVD comentados até então os fluxos antidifusivos, que controlam o montante de dissipação artificial presente no esquema, são avaliados de acordo com os sentidos das velocidades características. Eles formam uma classe de esquemas que levam em consideração o sentido de propagação da informação na avaliação desses fluxos denominada de **esquemas TVD *upwind***. Esses esquemas são obtidos a partir de outros esquemas tradicionais como o de Roe (1981a) e Lax Wendroff (1960). Um estudo sobre esses esquemas pode ser encontrado em Yee (1985). Yee (1987b) introduziu esquemas TVD que avaliam os termos antidifusivos independentemente do sentido das variáveis características. Os esquemas assim obtidos formam a classe de **esquemas TVD simétricos** e são uma generalização dos trabalhos de Roe (1984) e Davis (1984). Assim como os esquemas TVD *upwind*, eles também são obtidos de esquemas tradicionais.

O uso de malhas retangulares apesar de facilitar o emprego de expansões em série de Taylor torna-se bastante trabalhoso para problemas mais realistas onde em geral a geometria não é quadrada. Para contornar essa dificuldade pode-se fazer uso de coordenadas curvilíneas coincidentes com as fronteiras (*boundary fitted coordinates*) que têm a propriedade de se adaptarem às fronteiras (Thompson, 1985). Yee e Kutler (1985) e Yee e Harten (1987) estenderam o esquema TVD para essas coordenadas. Takakura *et al.* (1989) propuseram modificações no fluxo numérico de forma a melhorar a captura do choque. Para se trabalhar em geometrias cada vez mais arbitrárias procurou-se usar formulações mais próximas de volumes finitos (Yee e Harten, 1987).

Testes feitos com os esquemas TVD *upwind* e simétricos (Yee, 1987a; Lobão, 1992) procuraram verificar diferenças entre essas classes. Os esquemas *upwind* demonstraram captar melhor as descontinuidades de contato. Os esquemas simétricos possuem resolução semelhante aos *upwind* nos choques, no entanto, conferem melhor estabilidade numérica, são computacionalmente mais baratos de serem avaliados (por passo de tempo) e são menos sensíveis ao tratamento das condições de contorno. Não se deve associar o nome da classe dos esquemas de alta resolução à performance dos esquemas tradicionais de mesmo nome, uma vez que o nome da classe apenas diz respeito à forma com que os termos de alta ordem, limitados, são avaliados.

A ordem do esquema TVD se refere ao erro de truncamento em regiões suaves da solução. O TVD reduz o esquema à primeira ordem nas regiões de descontinuidades. Existem hoje esquemas TVD que conseguem obter até décima quinta ordem (Osher e Chakravarthy, 1986). Outros esquemas mais recentes como UNO (*Uniformly Non Oscillatory*) e ENO

(*Essentially Non Oscillatory*) mantém alta ordem inclusive nas regiões de discontinuidades. Junto com o ganho de resolução ocorre um considerável aumento na complexidade desses esquemas. Muito das propriedades desses esquemas ainda não foram demonstradas analiticamente e se baseiam em resultados de experimentos numéricos. Maiores detalhes desses esquemas podem ser obtidos em Harten e Osher (1987) e Shu e Osher (1988).

O esquema de Jameson *et al.* (1981) parece se situar entre os esquemas tradicionais e os de alta resolução. Ele introduz uma mistura de termos de segunda e quarta ordem como dissipação artificial. Um sensor de choque faz uma ponderação de tal forma que os termos de segunda ordem prevaleçam em regiões de discontinuidades. O método de Runge-Kutta de quatro passos junto com outras técnicas conferem ao esquema um aumento do limite CFL e segunda ordem de precisão no tempo. Mais tarde, Jameson e Mavriplis (1986) estenderam o esquema original para malhas não estruturadas e aplicaram técnicas *multigrid* e de suavização do resíduo para aumentar a convergência do esquema. Bortoli (1995) utilizou essas técnicas num Runge-Kutta de cinco passos estendendo o esquema para escoamentos incompressíveis ($M = 0,005$).

Shinn *et al.* (1987) e Yee e Shinn (1989) aplicaram os esquemas TVD em sistemas de equações conservativas hiperbólicas com termos fontes do tipo *stiff* (dominantes) típicos de escoamentos hipersônicos onde ocorre desequilíbrio térmico e químico. Nesses trabalhos foram propostos esquemas semi e totalmente implícitos a depender da dominância do termo fonte e acoplamento explícito entre as equações de fluido e espécies. LeVeque e Yee (1990) estudaram diferentes esquemas numéricos em problemas unidimensionais envolvendo termos fontes.

Chen *et al.* (1991) aplicaram os esquemas TVD para escoamentos reais turbulentos, transônicos e supersônicos, sobre um projétil a partir de um código baseado no esquema de Beam Warming (1976 e 1978). Para tornar o esquema de alta resolução os termos dissipativos são substituídos pelos correspondentes do TVD. Quatro esquemas foram testados, dois *upwind* (Van Leer, 1974; Roe, 1985) e dois simétricos (Davis, 1984; Yee, 1987). Eles adotaram o modelo de turbulência algébrico de comprimento de mistura de Baldwin e Lomax (1981). Os testes demonstraram que todos os quatros esquemas apresentam melhor desempenho que o esquema de Beam e Warming (1976 e 1978). No escoamento transônico os esquemas simétricos foram ligeiramente mais rápidos, mas os *upwind* foram menos sensíveis ao número de pontos.

Hwang e Liu (1991) aplicaram o esquema TVD simétrico em malhas não estruturadas (triangulares) juntamente com técnicas de malhas adaptativas usando o método de volumes finitos com arranjo *cell centered*. Hwang e Yang (1993) utilizaram malhas triangulares e quadriláteras simultaneamente. Lyra *et al.* (1994) aplicaram o esquema no método de elementos finitos (Galerkin) testando limitadores *upwind* e simétricos.

Rubin e Blunt (1991) e Blunt e Rubin (1992) usaram os esquemas TVD na simulação de reservatórios de petróleo. Eles resolveram o modelo Black-Oil (Aziz e Settari, 1979) usando uma formulação IMPES (*IMplicit Pressure Explicit Saturation*) e totalmente implícita em malhas cartesianas ortogonais uniformes aplicando o TVD apenas na equação da saturação. Pinto (1991) observou que apenas uma parte do fluxo era responsável pelo caráter hiperbólico da equação. Isso fez com que ele aplicasse o esquema TVD separadamente nos fluxos e nas permeabilidades relativas. Essa observação falha quando o gradiente de pressão se desvia do comportamento linear. Quando aplicado às permeabilidades relativas o esquema pode ser visto como um esquema de interpolação como definido no método de volumes finitos. Na sua dissertação Pinto (1991) fez o uso de malhas cartesianas ortogonais. Mota (1994) e Mota e Maliska (1994) estenderam o esquema para coordenadas generalizadas em volumes finitos. O esquema TVD

permitiu o uso de malhas mais grosseiras que os esquemas de interpolação upwind para um mesmo resultado.

Thakur e Shyy (1993) utilizaram o esquema TVD em métodos de solução seqüencial, como os encontrados em esquemas baseados na pressão, normalmente aplicados em problemas de escoamentos incompressíveis. Diferentes formas de avaliação das velocidades características e tratamento de termos fontes são apresentados. De uma maneira geral percebe-se um aumento da dissipação artificial necessária para eliminar oscilações em função dos métodos de solução seqüenciais.

Em escoamentos incompressíveis o campo de densidade é desacoplado do campo de pressão. Considerando apenas um problema hidrodinâmico bidimensional as incógnitas serão as componentes cartesianas u e v do vetor velocidades e a pressão P . Essas incógnitas devem ser obtidas das equações da conservação da massa, ou continuidade, e da conservação da quantidade de movimento linear em x e y . As duas últimas são equações naturais para se obter os campos de u e v . O campo de pressão deve então ser obtido a partir da equação da continuidade o que não pode ser feito da forma direta. O fato de não existir compressibilidade do fluido torna o campo de pressão fortemente acoplado ao campo de velocidades. À essa relação é dado o nome de acoplamento pressão-velocidade. Harlow e Welch (1965) propuseram um método explícito de tratar o acoplamento, mas este apresentava altos custos computacionais. O SIMPLE (*Semi Implicit Linked Equations*) de Patankar e Spalding (1972), baseados nas idéias de Chorin (1967, 1971), serviu de base para vários outros métodos bastante utilizados até hoje como o SIMPLER (Patankar, 1980), SIMPLEC (Van Doormall e Raithby, 1984) e PRIME (Maliska, 1981).

Os métodos de acoplamento pressão-velocidade em volumes finitos inicialmente foram aplicados em arranjos desencontrados de variáveis por estes evitarem o aparecimento de campos de pressão do tipo “*tabuleiro de xadrez*” (Patankar, 1980). Esse arranjo, no entanto, se torna indesejável à medida que cresce o número de dimensões do problema, aumentando a complexibilidade do algoritmo devido ao controle dos *loops*, dificultando sua programação e implementação. O arranjo co-localizado proporciona uma lógica única de armazenamento das variáveis tornando a estrutura do algoritmo mais simples. Rhie e Chow (1983) desenvolveram métodos de solução em arranjos co-localizados que não apresentavam o erro do tipo “*tabuleiro de xadrez*”. Lien e Leschziner (1994b) observaram que essa extensão indiretamente introduz termos de dissipação no acoplamento pressão-velocidade.

Gaskell e Lau (1988) por meio de uma análise de precisão, estabilidade e limitação (*boundness*) dos termos convectivos chegaram aos critérios CBC (*Convective Boundness Criterion*). Esses critérios podem ser aplicados à esquemas de até cinco pontos (Leonard, 1991) e quando satisfeitos, garantem a monotonicidade do esquema de interpolação. Esses critérios podem ser facilmente aplicados no diagrama NVD (*Normalized Variable Diagram*), um plano auxiliar de trabalho onde os esquemas podem ser visualizados como funções de uma única variável (normalizada). Nesse trabalho de Gaskell e Lau foi desenvolvido o algoritmo SMART (*Sharp and Monotonic Algorithm for Realistic Transport*). Leonard (1988) faz uma combinação do EULER (*Exponential Upwind or Linear Extrapolation Refinement*) (Leonard, 1983) e do QUICK (Leonard, 1979a), no diagrama NVD, para obter o algoritmo SHARP (*Simple High Accuracy Resolution Program*).

Tamamdis e Assanis (1993) procuraram avaliar os efeitos de limitadores em esquemas de interpolação de alta ordem e Peters (1994) fez um extensão do MSOU (*Monotonic second order upwind*) para malhas não-uniformes. Um estudo comparativo de diferentes esquemas que atendem os critérios CBC para um problema de convecção escalar foi realizada por Darwish

(1993). Lien e Leschziner (1994a, b) aplicaram esses esquemas em coordenadas curvilíneas para escoamentos laminares e turbulentos em regime de qualquer velocidade e arranjo co-localizado.

Marchi (1993), independentemente, num estudo sobre as causas da difusão e oscilação numérica apresentou o procedimento CEL (Coeficientes Explicitamente Limitados) para esquemas de interpolação de alta resolução composto de duas etapas. A primeira envolve a avaliação da propriedade na face e a segunda a avaliação dos coeficientes para a expressão geral de Raithby e Torrance (1974). Nesse trabalho, Marchi, propõe um esquema centrado de interpolação, o ADS (*Adaptable Difference Scheme*).

1.3 Escopo do Trabalho

Os esquemas de alta resolução conseguem conciliar a monotonicidade com a captura de descontinuidades de alta ordem de precisão. Para o desenvolvimento e extensão desses esquemas é necessário um bom entendimento dos mecanismos de dissipação e oscilação numérica. Esse conhecimento permite que limitadores específicos sejam desenvolvidos para melhorar a performance de esquemas tradicionais de primeira, segunda ou maior ordem. Esses esquemas foram desenvolvidos no método de diferenças finitas sendo difícil encontrar bibliografias a respeito desse assunto no método de volumes finitos. O objetivo desse trabalho, é o de trazer as informações dos esquemas de alta resolução para os usuários do método de volumes finitos. Os conceitos desses esquemas podem ser empregados para o desenvolvimento de esquemas de interpolação que apresentem características de alta resolução. Por esse motivo, o presente trabalho se mostra oportuno.

No segundo capítulo apresenta-se alguns aspectos importantes relacionados aos modelos matemáticos de problemas hiperbólicos e esquemas de alta resolução. Alguns detalhes de leis de conservação, esquemas monótonos e esquemas conservativos são abordados.

No terceiro capítulo será conduzida uma discussão à respeito dos mecanismos de formação dos erros numéricos. Alguns dos esquemas clássicos unidimensionais utilizados como base do desenvolvimento dos esquemas de alta resolução serão apresentados e comentados.

No quarto capítulo as condições básicas dos esquemas *Total Variation Diminishing* (TVD) são apresentadas. Os esquemas TVD via fluxo modificado são obtidos a partir do esquema TVD de primeira ordem. A região TVD de segunda ordem é obtida para os esquemas TVD de fluxo limitado e alguns limitadores da literatura são apresentados.

No quinto capítulo os esquemas de interpolação do tipo NVD são apresentados. O diagrama NVD é obtido para os critérios CBC onde diversos esquemas de interpolação tradicionais são representados por retas. É feita uma extensão da idéia de limitadores para esses esquemas de interpolação num paralelo com os esquemas TVD. São obtidas as expressões de limitadores para diversos esquemas de interpolação.

No sexto capítulo são apresentados os resultados obtidos usando os esquemas estudados nesse trabalho. Os esquemas simultâneos são testados em problemas envolvendo choques e rarefações. Uma abordagem sequencial para esses problemas é investigada. Os esquemas de interpolação são comparados para o problema da cavidade quadrada. No sétimo capítulo conclusões e recomendações para futuros trabalhos são apresentadas.

2 ASPECTOS MATEMÁTICOS

Antes de começar a resolver uma equação numericamente é importante que se conheça suas características matemáticas para que se possa escolher ou desenvolver um esquema numérico que as aproveite da melhor forma possível. A modelação matemática de problemas gerais em mecânica dos fluidos e transferência de calor leva a um conjunto de **leis de conservação** formando um sistema de equações diferenciais parciais não-lineares. A depender do fenômeno físico modelado, as características matemáticas e conseqüentemente os esquemas numéricos variam bastante. A equação de transporte unidimensional, escalar e não-linear,

$$\underbrace{\frac{\partial \phi}{\partial t}}_{\text{termo transiente}} + \underbrace{\frac{\partial f(\phi)}{\partial x}}_{\text{termo convectivo}} = \underbrace{\Gamma \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}}_{\text{termo difusivo}} \quad (2.1)$$

onde Γ é um coeficiente de difusividade de uma propriedade ϕ , representa um bom modelo para análise por ser simples, mas que pode possuir as não-linearidades que se deseja investigar. O termo difusivo da Eq.(2.1) possui características lineares cuja teoria é bem estabelecida. A dominância do termo difusivo produz soluções suaves, ou seja, pequenos gradientes. Por outro lado, o termo convectivo da Eq.(2.1) possui características não-lineares cuja teoria ainda não é bem estabelecida se comparada com a teoria linear. Quando dominante esse termo pode produzir descontinuidades na solução mesmo que sua condição inicial seja suave.

Do ponto de vista numérico o tratamento dos termos convectivos ainda é um grande desafio. Por esse motivo o foco de nossa discussão será voltado às equações diferenciais hiperbólicas,

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \frac{\partial f(\phi)}{\partial x} = 0 \quad (2.2)$$

que é o caso limite da Eq.(2.1) quando $\Gamma \rightarrow 0$. Toda equação que pode ser escrita dessa forma (Eq. 2.2) pode ser considerada uma lei de conservação (Sod, 1985).

2.1 Leis de Conservação Hiperbólicas

Considere a lei de conservação hiperbólica dada pela Eq.(2.2) e a relação entre a derivada lagrangeana e euleriana para uma dimensão,

$$\frac{D\phi}{Dt} = \frac{\partial \phi}{\partial t} + u \frac{\partial \phi}{\partial x} \quad (2.3)$$

Fazendo uma comparação entre as Eq.(2.3) e a Eq. (2.2) na sua forma quase-linear,

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + a(\phi) \frac{\partial \phi}{\partial x} = 0 \quad (2.4)$$

pode-se considerar $a(\phi)$ uma **velocidade característica**, dada por,

$$a(\phi) \equiv \frac{\partial f(\phi)}{\partial \phi} \quad (2.5)$$

Pela interpretação da derivada lagrangeana, dada pela Eq.(2.3), sabe-se que a propriedade ϕ é constante e é transportada pela velocidade característica, $a(\phi)$, ao longo de uma trajetória denominada **linha característica**. Quando $a(\phi)$ é constante a Eq.(2.2) é linear. Como ϕ é constante ao longo da linha característica conclui-se que o mesmo ocorre com a velocidade característica, $a(\phi)$. No plano xt , figura 2.1, as linhas características são retas cuja inclinação depende do valor da propriedade ϕ . Para a condição inicial, dada por,

$$\phi(x, 0) = \phi_0(x) \quad (2.6)$$

para $t < t_1$ (a princípio) pode-se obter o valor de ϕ para qualquer x (figura 2.1) através das velocidades características. As Eqs.(2.2 e 2.6) definem um problema de valor inicial. Para $t = t_1$ as linhas a_2 e a_3 se cruzam e a partir desse momento pode haver dois valores possíveis da propriedade num mesmo ponto. Isso é fisicamente inconsistente. Na física a convergência de linhas características indicam o surgimento de discontinuidades na solução, o que invalida o modelo diferencial (Eq.2.2) a partir desse ponto. Para obter a solução para $t > t_1$ deve-se trabalhar com a forma integral da (Eq. 2.2).

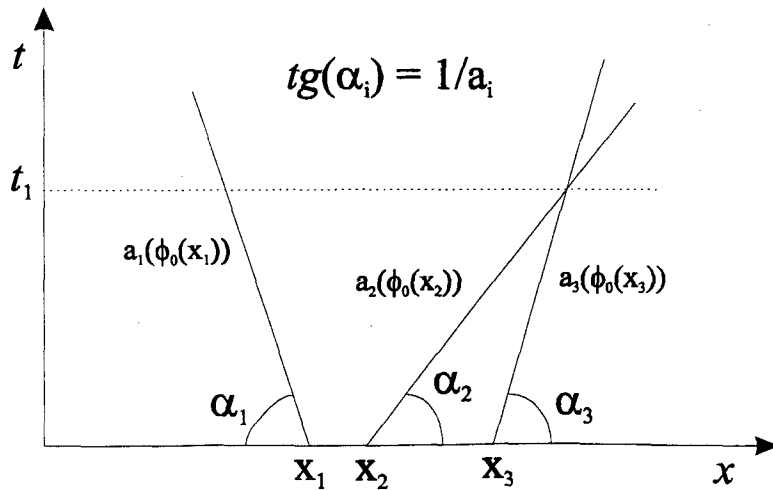


Figura 2.1 - Linhas características.

Considere um operador $\bar{\nabla} \equiv (\partial_t, \partial_x)$ e um vetor $\bar{\mathbf{w}}_\phi \equiv (\phi, F(\phi))$. A partir dessas definições pode-se reescrever a Eq. (2.2) como,

$$\bar{\nabla} \cdot \bar{\mathbf{w}}_\phi = 0 \quad (2.7)$$

Seja $\Theta(x,t)$ uma função suave escalar que se anula fora de um intervalo $|x|$ suficientemente grande (Lax, 1954), *i.e.*, uma função de suporte compacto. Integrando o produto de Θ com a Eq. (2.7) para $-\infty < x < \infty$ e $t \geq 0$, obtém-se,

$$\int_0^\infty \int_{-\infty}^\infty \Theta \bar{\nabla} \cdot \bar{\mathbf{w}}_\phi dx dt = 0 \quad (2.8)$$

Aplicando o teorema da divergência obtém-se a **forma fraca da lei de conservação** hiperbólica Eq.(2.2),

$$\int_0^\infty \int_{-\infty}^\infty (\bar{\nabla} \Theta) \cdot \bar{\mathbf{w}}_\phi dx dt + \int_{-\infty}^\infty \Theta(x,0) \phi_0(x) dx = 0 \quad (2.9)$$

cuja solução é chamada **solução fraca**. A Eq.(2.9) admite várias soluções. Para selecionar apenas a solução fisicamente relevante é preciso impor outras restrições.

Uma restrição física que deve ser satisfeita através de uma descontinuidade é a condição de Rankine-Hugoniot, ela relaciona o salto do fluxo e da propriedade conservada com uma velocidade de propagação. Sendo S a velocidade de propagação da descontinuidade e ϕ_L e ϕ_R os estados à esquerda e à direita da descontinuidade, respectivamente, essa condição diz que,

$$S(\phi_R - \phi_L) = f(\phi_R) - f(\phi_L) \quad (2.10)$$

A condição de Rankine-Hugoniot (Eq. 2.10) diminui o número de soluções possíveis da Eq.(2.9) mas não é suficiente para selecionar apenas uma (a solução física). Oleinik (1957) observou que a solução fisicamente correta deve satisfazer a condição,

$$\frac{f(\phi) - f(\phi_L)}{\phi - \phi_L} \geq S \geq \frac{f(\phi) - f(\phi_R)}{\phi - \phi_R} \quad (2.11)$$

para qualquer ϕ entre ϕ_L e ϕ_R . A Eq.(2.11) é conhecida como condição de entropia. Para um problema de escoamento invíscido essa condição implica num aumento de entropia através de um choque. A solução fraca que satisfaz à condição de entropia (Eq. 2.11) é única e atende à condição de Rankine-Hugoniot (Eq. 2.10) e é completamente determinada pela condição inicial (Eq. 2.6). Essa solução é a solução limite da Eq.(2.1) quando $\Gamma \rightarrow 0$. Se na Eq.(2.11) os sinais forem apenas desigualdades, ou seja as linhas características convergentes para um mesmo ponto, caracteriza-se um choque. Caso sejam igualdades, caracteriza-se uma descontinuidade de contato (Hirsch, 1988, Cap.16).

Na figura 2.1 as linhas características, referentes a a_1 e a_2 se afastam uma da outra. Um raciocínio físico sobre esse fato diz que a propriedade mais à frente, transportada por a_2 , nunca

será “alcançada” pela propriedade mais atrás, transportada por a_l . Como ϕ é constante ao longo das linhas características e a distância entre essas duas linhas só irá aumentar com o tempo, a transição será feita de forma cada vez mais suave com gradientes cada vez menores. Lax (1973) definiu um critério no plano xt para rejeitar soluções fracas que não atendam à condição de entropia (Eq. 2.11): *Linhas características que formam uma descontinuidade, começando em qualquer posição, tendem a intersectá-la à medida que o tempo aumenta*. Quando representado no plano xt (figura 2.1) a estrutura formada pelas linhas características é conhecida como **leque de expansão** ou **onda de rarefação**.

Até então se comentou aspectos qualitativos das soluções fracas. Considere a equação de Burgers invíscida como um caso particular da Eq.(2.2). O fluxo não-linear dessa equação é proporcional ao quadrado da propriedade ϕ semelhante ao termo convectivo das equações de conservação da quantidade de movimento linear. Sua forma conservativa é dada por,

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\phi^2}{2} \right) = 0 \quad (2.12)$$

A velocidade característica (Eq. 2.5), em cada ponto, para a equação de Burgers (Eq. 2.12) é a própria propriedade ϕ , $a(\phi) = \phi$. Considere a condição inicial (Eq. 2.6), dada por,

$$\phi(x,0) = \phi_0(x) = \begin{cases} \phi_L & , \quad x < 0 \\ \phi_R & , \quad x > 0 \end{cases} \quad (2.13)$$

As Eqs.(2.2 e 2.13) definem um **problema de Riemann**. Para uma condição inicial onde $\phi_L > \phi_R \Rightarrow a_L > a_R$, a solução desse problema tem a forma de uma **onda de choque** que se propaga com velocidade S , dada pela Eq.(2.14) e representada na figura 2.2.

$$S = \frac{\phi_L + \phi_R}{2} \quad (2.14)$$

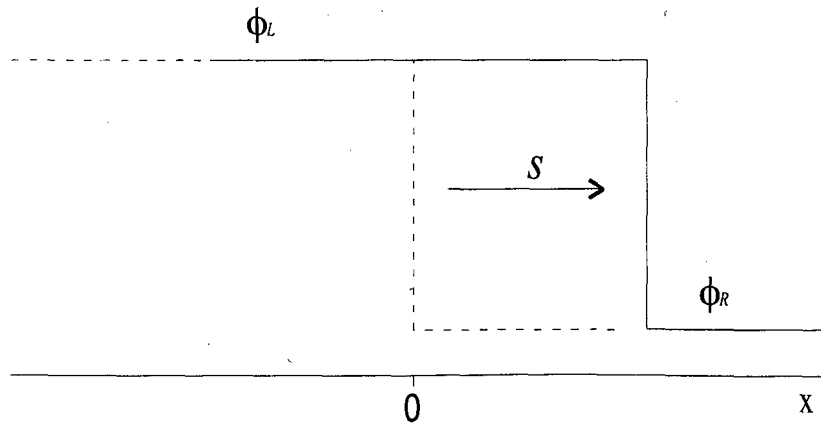


Figura 2.2 - Onda de choque.

Essa descontinuidade no plano característico é representada pela convergência das linhas características no plano xt . Observe que pelo fato da condição inicial (Eq. 2.13) já ser uma

descontinuidade em $t = 0$ a velocidade de propagação da onda será constante, dada pela Eq.(2.10), para qualquer $t > 0$, cuja solução geral será,

$$\phi(x, t) = \begin{cases} \phi_L & \text{se } (x - St) < 0 \\ \phi_R & \text{se } (x - St) > 0 \end{cases} \quad (2.15)$$

Modificando-se a condição inicial para $\phi_L < \phi_R \Rightarrow a_L < a_R$ na Eq.(2.13), a solução do problema de Riemann (Eqs. 2.2 e 2.13) será uma **rarefação**, dada pela Eq.(2.16). Na figura 2.3, escolheu-se em particular, $\phi_L = -1$ e $\phi_R = 1$, o que fará com que a onda de rarefação seja estacionária.

$$\phi(x, t) = \begin{cases} \phi_L & \text{se } x/t < \phi_L \\ x/t & \text{se } \phi_L \leq x/t \leq \phi_R \\ \phi_R & \text{se } x/t > \phi_R \end{cases} \quad (2.16)$$

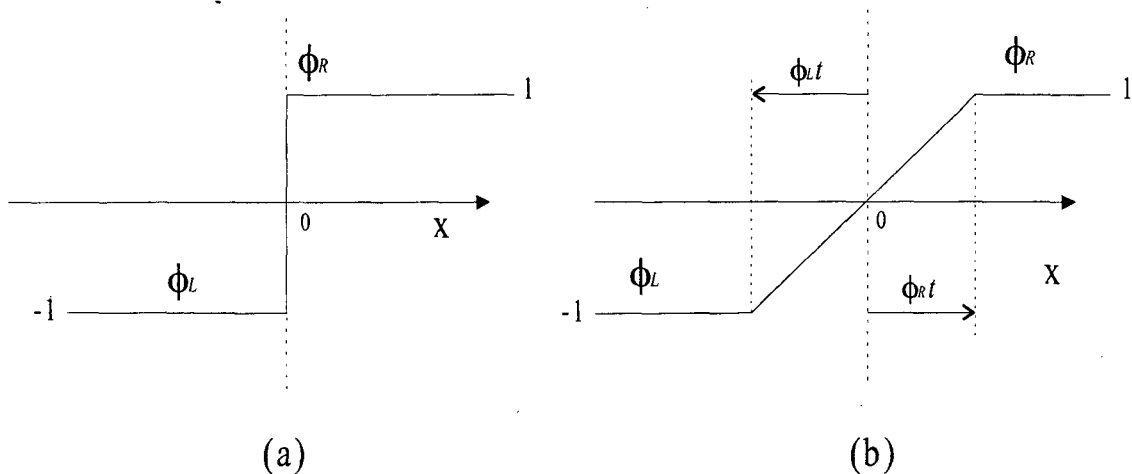


Figura 2.3 - Rarefação estacionária.

As Eqs.(2.15 e 2.16) são soluções fracas da Eq.(2.12) e satisfazem a condição de entropia (Eq. 2.11), o que automaticamente garante o atendimento à condição de Rankine-Hugoniot (Eq. 2.10). Outras soluções fracas além dessas podem existir porém sem significado físico. Para uma revisão mais aprofundada sobre esse assunto recomenda-se Sod (1985) e Hirsch (1988, Cap.16).

2.2 Esquemas Numéricos Conservativos

As soluções fracas (Eqs. 2.15 e 2.16) satisfazem a formulação fraca da lei de conservação hiperbólica (Eq. 2.2). Ao se resolver essas equações numericamente por métodos aproximados, espera-se que a solução numérica também satisfaça de forma aproximada as equações diferenciais. Lax (1954) mostrou que a discretização numérica das equações na forma conservativa é essencial para se captar corretamente a velocidade de propagação e a intensidade

de uma descontinuidade. Para um esquema numérico ser considerado conservativo, ele deve poder ser escrito na forma,

$$\phi_p^{n+1} = \phi_p^n - \lambda (\bar{f}_e - \bar{f}_w) \quad (2.17)$$

onde $\lambda = \Delta t / \Delta x$ e \bar{f}_e é uma função fluxo numérica avaliada na interface *east* (leste) (figura 2.4), da seguinte forma

$$\bar{f}_e = \bar{f}(\phi_{j-k+1}, \dots, \phi_{j+k}) \quad (2.18)$$

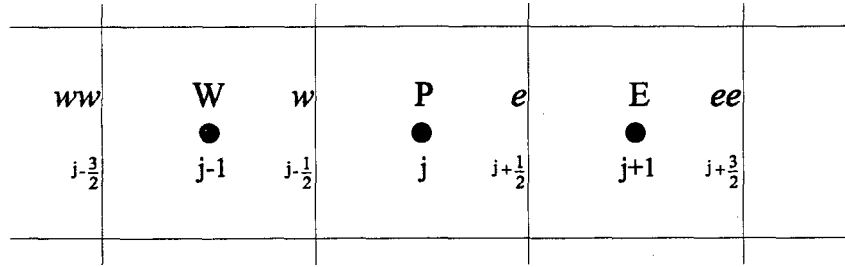


Figura 2.4 - Arranjo das variáveis no método de volumes finitos e diferença central.

Se requer que o fluxo numérico (Eq. 2.18) seja consistente de forma que se recupere a função fluxo original (Eq. 2.2) no caso de escoamento constante, ou seja

$$\bar{f}(\phi, \dots, \phi) = f(\phi) \quad (2.19)$$

Por simplicidade, o fluxo numérico a partir desse ponto em diante será expresso sem o travessão.

Lax e Wendroff (1960) provaram o seguinte teorema: “Se $v(x,t)$ é uma solução de um esquema de diferenças finitas na forma conservativa e converge, limitada, em quase todo x para uma função $u(x,t)$, então $u(x,t)$ é uma solução fraca da Eq.(2.2)”. Esse teorema assegura a consistência entre a solução numérica e a solução fraca dos esquemas conservativos.

2.3 Esquemas Monótonos

A solução numérica que satisfaz o teorema de Lax-Wendroff é consistente com a solução fraca da Eq.(2.2), porém nada garante que essa solução satisfaça a condição de entropia (Eq. 2.11). Para isso uma nova condição deve ser introduzida no esquema numérico. Os esquemas monótonos têm um papel importante nesse sentido. Para que um esquema numérico na forma de operador

$$\phi_j^{n+1} = L\phi^n = H(\phi_{j-k}, \dots, \phi_{j+k}) \quad (2.20)$$

seja monótono, é preciso que o operador H seja uma função crescente monótona de cada um dos argumentos, ou seja,

$$\frac{\partial H}{\partial \phi_{j-q}^n} \geq 0 \quad \text{para} \quad -k \leq q \leq k \quad (2.21)$$

Se H é consistente (Eq. 2.19) e pode ser escrito na forma conservativa (Eq. 2.17) então o esquema numérico está na forma conservativa. Harten *et al.* (1976) provaram o seguinte teorema: “Seja um esquema numérico monótono escrito na forma conservativa. Se a solução numérica ϕ_p^n converge limitadamente em quase todo domínio para uma função $\phi(x,t)$ quando Δx e $\Delta t \rightarrow 0$ mantendo λ constante, então $\phi(x,t)$ é uma solução fraca e satisfaz a condição de entropia (Eq. 2.11) em todas as discontinuidades.”. Esse teorema assegura a consistência entre a solução numérica e a solução fraca que atende à condição de entropia.

Embora a monotonicidade seja desejável por garantir o atendimento da condição de entropia (Eq. 2.11), ela limita o esquema a apenas primeira ordem de precisão (Godunov, 1959; Sod, 1985). Esquemas de primeira ordem introduzem difusão numérica na solução amortecendo fortes gradientes. Uma definição mais geral que esquemas monótonos é a de esquemas que **preservam a monotonicidade** (Harten, 1978). Essa definição não está restrita a apenas esquemas de primeira ordem e por isso pode ser usada na construção de **esquemas numéricos de alta resolução** (esquemas não oscilatórios de alta ordem). Um esquema numérico preserva a monotonicidade se para qualquer função monótona na malha ϕ , se obtém $\phi^{n+1} = H(\phi)$ também monótona.

Para esquemas lineares escritos na forma,

$$\phi_i^{n+1} = \sum_k A_k \phi_{i+k}^n \quad (2.22)$$

a condição de monotonicidade impõe a positividade dos coeficientes, ou seja, $A_k \geq 0$.

3 DISSIPACÃO E OSCILAÇÃO NUMÉRICA

Nesse capítulo será apresentado uma discussão a respeito da dissipação e oscilação numérica de diversos esquemas. Serão apenas consideradas apenas malhas igualmente espaçadas (figura 2.4).

Quando o termo difusivo da Eq.(2.1) é dominante, a solução apresenta variações suaves e a discretização por diferença central não acarreta problemas de estabilidade. A discretização do termo convectivo, ao contrário do termo difusivo, é problemática e pode provocar dissipação ou oscilação em relação à solução analítica. O sucesso dos esquemas de alta resolução está fortemente relacionado ao tratamento numérico adequado dos termos convectivos. O foco dessa discussão, portanto, será voltada para esses termos, por serem a principal fonte dos erros numéricos. Para isso será considerada a lei de conservação hiperbólica (Eq. 2.2) e sua forma quase-linear (Eqs. 2.4 e 2.5).

Para o caso linear as análises de estabilidade e precisão fornecem informações completas. Na aplicação prática da Mecânica dos Fluidos a grande maioria dos problemas possuem características não-lineares. Apesar de não ser a ideal, a análise linear fornece a base para a compreensão das não-linearidades, servindo muitas vezes como caso limite. Muitos dos esquemas numéricos desenvolvidos para tratar problemas não-lineares gerais não possuem demonstração formal de suas características, mas baseiam-se principalmente em resultados de experimentos numéricos.

Em todo texto teve-se a preocupação de evitar o uso da palavra “dispersão” para evitar problemas de interpretação. Tanto na língua portuguesa (Marchi, 1993; Pinto, 1991) como na língua inglesa (Hirsch, 1988, Cap.8; Thakur e Shyy, 1993) essa palavra já foi usada com o sentido de dissipação e oscilação. Dessa forma serão usadas as expressões “dissipação” e “oscilação”, mais usual na literatura (Maliska, 1995, Cap.5), por não deixarem dúvidas quanto ao fenômeno que se quer destacar. Enquanto que a primeira está relacionada ao amortecimento de descontinuidades que provoca uma perda de resolução, a última está relacionada ao efeito contrário do amortecimento, ou seja, a amplificação dos erros numéricos que, quando não controlados adequadamente, podem provocar até o colapso do esquema numérico.

As expressões “difusão” e “dissipação” são usadas muitas vezes com o mesmo sentido, porém vale a pena fazer algumas diferenciações. A difusão está relacionada a termos na forma do lado direito da Eq.(2.1), ou seja, uma derivada de segunda ordem multiplicada por um coeficiente positivo. A difusão pode ser física ou numérica. No primeiro caso ela representa o fenômeno de difusão da propriedade ϕ no fluido onde o coeficiente de difusividade, Γ , é uma característica física do fluido. No segundo caso o coeficiente de difusividade numérico, Γ_{num} , não possui nenhuma relação com o fluido mas sim com os parâmetros da discretização numérica. A difusão numérica só será chamada assim quando $\Gamma_{num} > 0$.

Outros termos com características de amortecimento, relacionadas a termos de derivadas de ordem maior que dois, pela diferenciação adotada nesse texto, serão incluídas no conceito mais geral de “dissipação”. A expressão dissipação, portanto, abriga sobre uma mesma classificação todos os termos com características de amortecimento. Dessa forma pode-se considerar a difusão, física ou numérica, como um caso particular de dissipação.

Ao referir-se à ordem do esquema está-se, salvo contrário, referindo-se à ordem do coeficiente numérico do primeiro termo do erro de truncamento. Em todos os esquemas investigados utilizou-se o esquema de Euler, discretização à jusante, nos termos temporais.

Como problema teste para os diversos esquemas a serem testados será resolvida a equação de transporte escalar (Eq. 2.2), para um problema linear (Eq.(2.4), $a(\phi) = cte$) e a equação de Burgers (Eq. 2.12) com uma condição inicial formada por uma função degrau. No problema linear esse perfil deve ser simplesmente advectado, enquanto que no problema não-linear haverá formação de choque e rarefação.

3.1 Esquema UDS

O esquema UDS (*Upstream Difference Scheme*), ou *upwind*, proposto por Courant *et al.* (1952) leva em consideração o sinal da velocidade característica (Eq. 2.5) na discretização do termo convectivo, ou autovalor, para um sistema de equações. Nesse esquema a propriedade, ou fluxo, da face é aproximado pelo correspondente do nó a montante. Considerando uma velocidade característica positiva, $a = cte > 0$, a discretização explícita da Eq.(2.2) resulta em

$$\phi_P^{n+1} = \phi_P^n - \lambda (f_P^n - f_W^n) \quad (3.1)$$

ou

$$\phi_P^{n+1} = \phi_P^n - v (\phi_P^n - \phi_W^n) \quad v > 0 \quad (3.2)$$

para o caso linear, onde o parâmetro v , dado por

$$v = \frac{\Delta t}{\Delta x} a = \lambda a \quad (3.3)$$

é conhecido como **CFL** ou **número de Courant** (Courant *et al.* 1928). Esse número representa uma razão entre o domínio físico ($a\Delta t$) e o domínio computacional (Δx).

Ao se reescrever a Eq.(3.2) na forma de uma diferença central acrescido de uma correção (Eq. 3.4) perceber-se-á que essa correção, que é a diferença entre os dois esquemas, representa uma difusão numérica. Um outro aspecto importante, é que para problemas de regime permanente a solução numérica será independente do passo de tempo adotado.

$$\phi_P^{n+1} = \phi_P^n - \frac{v}{2} (\phi_E^n - \phi_W^n) + \frac{v}{2} (\phi_E^n - 2\phi_P^n + \phi_W^n) \quad (3.4)$$

Uma análise da equação modificada resultante (Anderson *et al.*, 1984, Cap.4) para o esquema UDS (Eq. 3.2) fornece o seguinte erro de truncamento,

$$\begin{aligned} \frac{\partial \phi}{\partial t} + a \frac{\partial \phi}{\partial x} = & a \frac{\Delta x}{2} (1 - \nu) \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + a \frac{(\Delta x)^2}{6} (2\nu^2 - 3\nu + 1) \frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3} \\ & + a \frac{(\Delta x)^3}{24} (6\nu^3 - 12\nu^2 + 7\nu - 1) \frac{\partial^4 \phi}{\partial x^4} + O(\Delta x^4) \end{aligned} \quad (3.5)$$

A Eq.(3.5) nos mostra que o esquema é de primeira ordem e que o primeiro termo do erro de truncamento é um termo de difusão numérica. Em Maliska (1995, Cap.5) os esquemas que originam erros de truncamento dessa natureza são classificados de esquemas dissipativos. O coeficiente de difusão numérica na Eq.(3.5) é dado por

$$\Gamma_{num} = a \frac{\Delta x}{2} (1 - \nu) \quad (3.6)$$

Esse esquema explícito é estável para a condição CFL, $0 \leq \nu \leq 1$. É interessante observar que quando $\nu = 1$ os erros de truncamento, lado direito da Eq.(3.5), se anulam, significando que a equação modificada se torna a própria Eq.(2.4). Portanto, a solução numérica da Eq.(3.2) é a própria solução analítica (Maliska, 1995, Cap.5). Isso acontece porque, para esse caso, a avaliação da propriedade pelo valor do nó a montante não é uma aproximação, mas sim, seu comportamento exato.

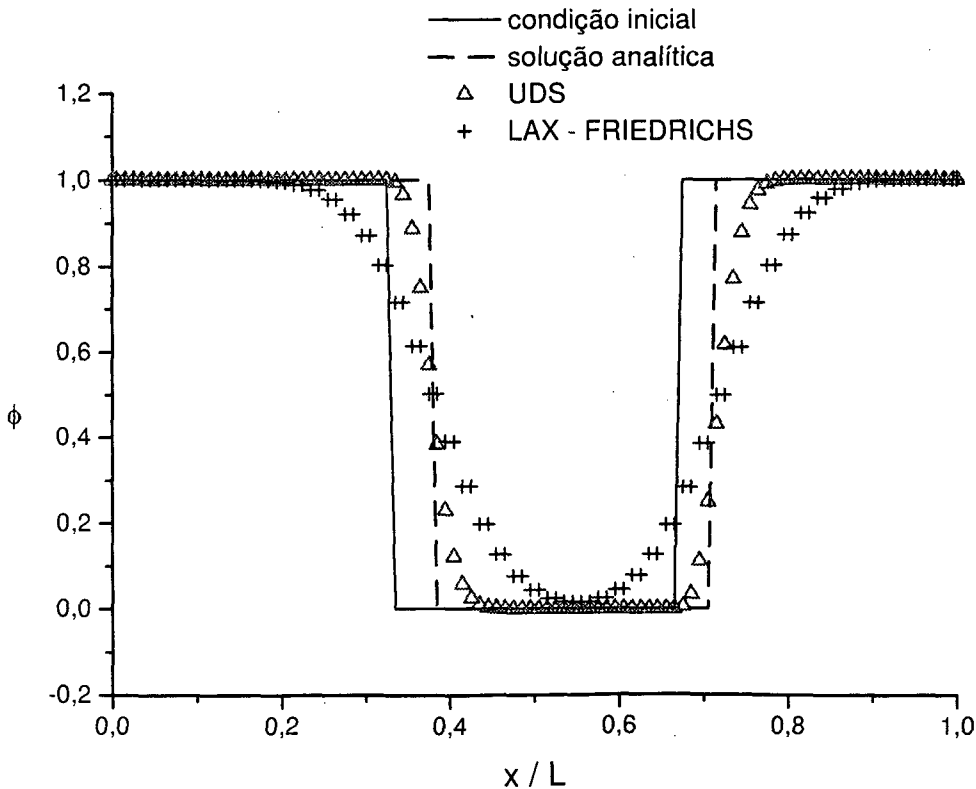


Figura 3.1 - Comportamento dos esquemas numéricos de primeira ordem para eq. de advecção linear.

A figura 3.1 demonstra que os termos dissipativos dominam a solução. A influência desses termos será maior quanto menor for o CFL (Eq. 3.5). Para se obter a máxima resolução desse esquema é necessário que se adote um CFL o mais próximo do limite de estabilidade possível. Para problemas não-lineares esse esquema apresenta problemas para satisfazer a condição de entropia (Eq.2.11) quando ocorre mudança no sinal da velocidade característica. Na figura 3.2 esse problema é captado. Para resolvê-lo, se introduz dissipação numérica na transição do valor da velocidade característica (Harten, 1983; LeVeque, 1990, Cap.16).

3.2 Esquema de Diferenças Centrais

Embora quase nunca seja empregado isoladamente na discretização de termos convectivos, o esquema de diferenças centrais é largamente utilizado no método de diferenças finitas em conjunto com outras técnicas que tentam anular seus problemas. O esquema representa a idéia mais simples para se interpolar um valor entre dois pontos ao assumir um perfil linear entre os mesmos.

A discretização do termo difusivo da Eq.(2.1) por diferenças centrais, leva a erros de truncamento contendo apenas termos dissipativos (Eq. 3.7). A razão para isso é a aproximação linear de um termo também linear, como a derivada segunda. Segundo Lomax *et al.* (1970) o termo de derivada quarta, para ser dissipativo, deve ter coeficiente numérico de sinal negativo. A Eq.(3.7) é portanto uma aproximação (dissipativa) de segunda ordem.

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} = \frac{\phi_E - 2\phi_P + \phi_W}{\Delta x^2} - \frac{\Delta x^2}{12} \frac{\partial^4 \phi}{\partial x^4} + O(\Delta x^4) \quad (3.7)$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial x} = \frac{\phi_E - \phi_W}{2\Delta x} - \frac{\Delta x^2}{6} \frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3} - \frac{\Delta x^4}{120} \frac{\partial^5 \phi}{\partial x^5} + O(\Delta x^6) \quad (3.8)$$

Quando aplicado na discretização de termos convectivos, de características não-lineares, o esquema de diferenças centrais leva ao surgimento de oscilações em regiões não suaves. A Eq.(3.8) apresenta os erros de truncamento para um caso linear, nela percebe-se apenas termos oscilatórios. Como o uso de diferenças centrais leva a esquemas instáveis faz-se necessário utilizar técnicas numéricas que introduzam uma certa dissipação para suprir essa deficiência natural do esquema. Aplicando-se esse esquema na discretização dos termos convectivos da Eq.(2.2) para um caso linear, obtém-se

$$\phi_P^{n+1} = \phi_P^n - v \frac{(\phi_E^n - \phi_W^n)}{2} \quad (3.9)$$

A equação modificada (Eq. 3.10) demonstra a ausência de dissipação desse esquema. Mesmo quando $v = 1$ os termos oscilatórios não se anulam. Esse comportamento oscilatório é bem visível na figura 3.3. Comparando o primeiro erro de truncamento com o correspondente do esquema *upwind* (Eq. 3.5) percebe-se que a ausência da difusão numérica torna esse termo oscilatório.

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + a \frac{\partial \phi}{\partial x} = a \frac{(\Delta x)}{2} (-v) \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{(\Delta x)^2 a}{6} (7v^2 - 1) \frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3} + O(\Delta x^3) \quad (3.10)$$

Em Maliska (1995, Cap.5) os esquemas que originam erros de truncamento dessa natureza, ou seja, provocam oscilações na solução, são classificados de esquemas não-dissipativos

3.3 Esquema Lax-Friedrichs

O esquema de Euler (Eq. 3.9) não possui estabilidade. Para estabilizá-lo, o esquema de Lax-Friedrichs (Lax, 1954) substitui a propriedade ϕ avaliada no instante "n" por uma diferença central também avaliada nesse mesmo instante, Eq.(3.11).

$$\phi_P^{n+1} = \frac{\phi_E^n + \phi_W^n}{2} - v \frac{(\phi_E^n - \phi_W^n)}{2} \quad (3.11)$$

Esse procedimento equivale à adição direta de uma difusão numérica no esquema de Euler (Eq. 3.9), cujo coeficiente é $\frac{1}{2}$ ficando mais claro quando escrito da seguinte forma:

$$\phi_P^{n+1} = \phi_P^n - v \frac{(\phi_E^n - \phi_W^n)}{2} + \frac{1}{2} (\phi_E^n - 2\phi_P^n + \phi_W^n) \quad (3.12)$$

Essa difusão introduzida pelo esquema de Lax-Friedrichs é suficiente para mudar o comportamento oscilatório da solução para amortecido e satisfazer a condição de entropia (figura 3.1 e figura 3.2). Para problemas de regime permanente o esquema nos fornecerá soluções independentes do *passo* de tempo pelo mesmo motivo que o esquema UDS. Uma análise da equação modificada para esse esquema (Anderson *et al.*, 1984, Cap.4),

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + a \frac{\partial \phi}{\partial x} = \frac{a \Delta x}{2} \left(\frac{1}{v} - v \right) \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + a \frac{(\Delta x)^2}{3} (1 - v^2) \frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3} + O(\Delta x^3) \quad (3.13)$$

nos mostra, mais uma vez, que o maior erro de truncamento, de primeira ordem, é uma difusão numérica cujo coeficiente pode ser reescrito da seguinte forma,

$$\Gamma_{num} = \frac{\Delta x^2}{2 \Delta t} (1 - v^2) \quad (3.14)$$

Se for feita uma comparação do esquema Lax com o esquema UDS (Eqs. 3.6 e 3.13), observar-se-á que a condição de estabilidade, $|v| \leq 1$, reflete a independência do primeiro quanto a direção de propagação da velocidade característica e que a difusão numérica introduzida é maior nesse esquema (Eq. 3.14) quanto menor for o CFL. A mesma observação a respeito da solução analítica para $v = 1$ do esquema UDS também se aplica ao presente esquema.

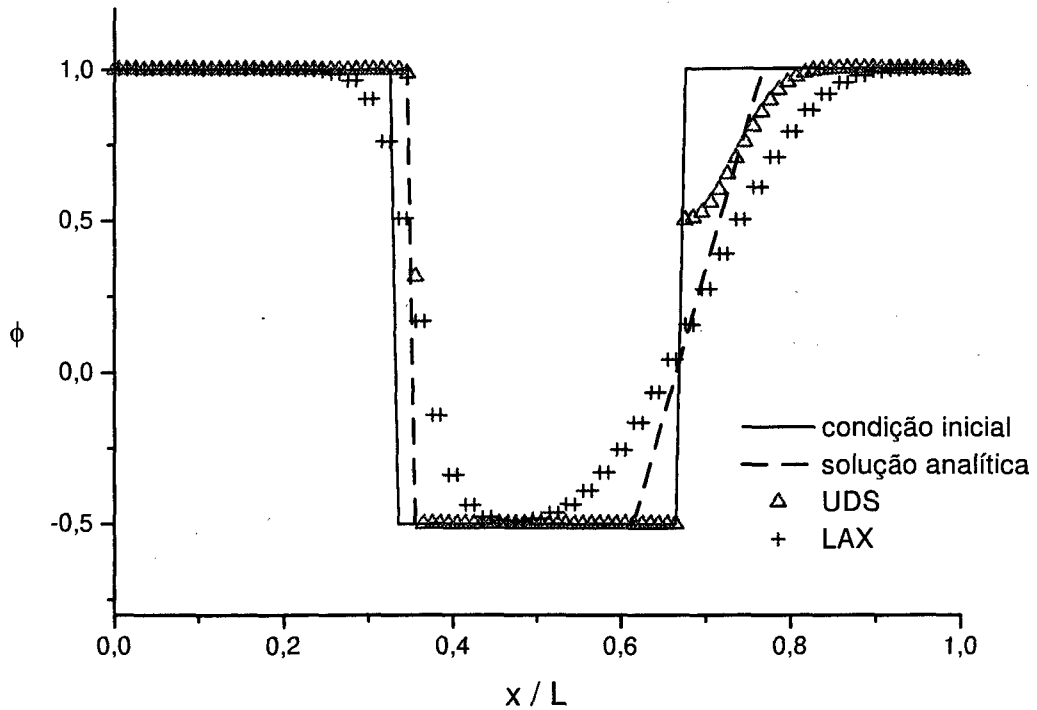


Figura 3.2 - Comportamento dos esquemas numéricos de primeira ordem para equação de Burgers.

3.4 Esquema Lax-Wendroff

O esquema de Lax-Wendroff (1960) representou uma evolução do esquema de Lax-Friedrichs (Lax, 1954) para segunda ordem no tempo e espaço. Esse esquema é obtido a partir de uma combinação entre discretização temporal e espacial. O avanço da solução no tempo é obtida através do desenvolvimento no tempo de uma expansão em série de Taylor

$$\phi_p^{n+1} = \phi_p^n + \Delta t \left. \frac{\partial \phi}{\partial t} \right|_p + \frac{\Delta t^2}{2} \left. \frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} \right|_p + O(\Delta t)^3 \quad (3.15)$$

Em seguida obtém-se expressões equivalentes para as derivadas de primeira e segunda ordem no tempo por relações envolvendo os termos convectivos obtidas a partir da Eq.(2.2)

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = - \frac{\partial f(\phi)}{\partial x} \quad \frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} = \frac{\partial}{\partial x} \left(a(\phi) \frac{\partial f}{\partial x} \right) \quad (3.16)$$

onde $a(\phi)$ está definida pela Eq.(2.5). Substituindo Eq.(3.16) na Eq.(3.15) elimina-se as derivadas temporais obtendo-se assim

$$\phi_p^{n+1} = \phi_p^n - \Delta t \frac{\partial f}{\partial x} \Big|_p + \frac{(\Delta t)^2}{2} \frac{\partial}{\partial x} \left(a(\phi) \frac{\partial f}{\partial x} \right) \Big|_p + O(\Delta t)^3 \quad (3.17)$$

A ordem de precisão no espaço vai depender do esquema numérico empregado. Para obter segunda ordem de precisão na Eq.(3.17) Lax e Wendroff (1960) utilizaram a clássica diferença central resultando em

$$\phi_p^{n+1} = \phi_p^n - \frac{\Delta t}{2\Delta x} (f_E^n - f_W^n) + \frac{1}{2} \left(\frac{\Delta t}{\Delta x} \right)^2 \left[a_e (f_E^n - f_P^n) - a_w (f_P^n - f_W^n) \right] \quad (3.18)$$

A avaliação da velocidade característica (Eq. 2.5) via diferença central na Eq.(3.18) deve ser feita de forma simétrica por uma média ou outra forma mais elaborada (Roe, 1981a). Para um problema linear a simplificação permite que se visualize o esquema como sendo um esquema de Euler (Eq. 3.9) acrescido de uma difusão numérica para diminuir o efeito da oscilação numérica, como,

$$\phi_p^{n+1} = \phi_p^n - \frac{v}{2} (\phi_E^n - \phi_W^n) + \frac{v^2}{2} (\phi_E^n - 2\phi_P^n + \phi_W^n) \quad (3.19)$$

Pode-se também reescrever a Eq.(3.19) numa forma *upwind* acrescido de um fluxo antidifusivo com o objetivo de diminuir a dissipação numérica,

$$\phi_p^{n+1} = \phi_p^n - v (\phi_P^n - \phi_W^n) + \frac{v}{2} (1 - v) (\phi_E^n - 2\phi_P^n + \phi_W^n) \quad (3.20)$$

Para problemas em regime permanente (Anderson *et al.*, 1992, Cap.5) o termo transiente é anulado ($\phi_p^{n+1} = \phi_p^n$) e a solução numérica deve satisfazer a Eq.(3.21). Essa equação mostra claramente a dependência da solução de regime permanente com o *passo* de tempo adotado.

$$\frac{a}{2\Delta t} (\phi_E^n - \phi_W^n) = \frac{a^2 \Delta t}{2} \left(\frac{\phi_E^n - 2\phi_P^n + \phi_W^n}{\Delta x^2} \right) \quad (3.21)$$

Essa é uma desvantagem geral dos esquemas de discretização temporal e espacial simultânea. Outra desvantagem é a pequena dissipação numérica (Eq. 3.20) embutida no esquema que não é suficiente para impedir o surgimento de oscilações em regiões de descontinuidades (figura 3.3 e figura 3.4). Essa dissipação é introduzida pelo termo da derivada de segunda ordem no tempo. Pode-se afirmar isso pois caso contrário ter-se-ia o esquema de Euler (Eq. 3.9), que não possui dissipação numérica. A equação modificada, dada por,

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + a \frac{\partial \phi}{\partial x} = -a \frac{(\Delta x)^2}{6} (1 - v^2) \frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3} - \frac{a(\Delta x)^3}{8} v (1 - v^2) \frac{\partial^4 \phi}{\partial x^4} + O(\Delta x^4) \quad (3.22)$$

Apresenta uma oscilação numérica no primeiro termo do erro de truncamento (Anderson *et al.*, 1984, Cap.4) evidenciando o comportamento da solução desse esquema. Analisando a

figura 3.3 e figura 3.4 percebe-se um aumento de resolução na captura da descontinuidade às custas da predominância de termos oscilatórios na solução em relação ao esquema de Lax-Friedrichs. No problema não-linear a solução viola a condição de entropia. Para o caso linear vale a mesma observação para $v = 1$ dos esquemas anteriores.

Uma explicação para a mudança de comportamento da solução pode ser feita em função da alteração dos erros de truncamento da Eq.(3.13) para a Eq.(3.22) em função do esquema de Lax-Wendroff.

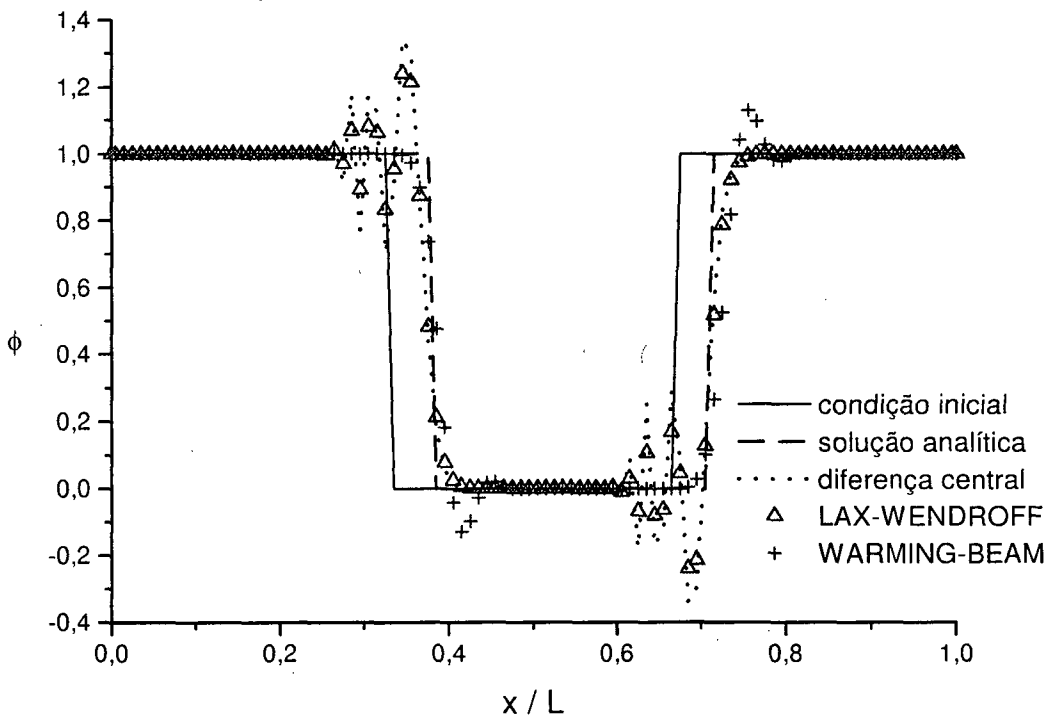


Figura 3.3 - Comportamento dos esquemas de segunda ordem para equação de advecção linear.

O esquema de Lax-Wendroff caracteriza uma família de esquemas para problemas não-lineares (figura 3.4) cujas características principais são a discretização combinada de tempo e espaço e o uso de diferenças centrais na discretização espacial. Para o caso linear (figura 3.3) os esquemas dessa família se reduzem ao esquema original (Eq. 3.19), por isso apenas ele é mostrado.

No esquema de Lax-Wendroff (Eq. 3.18) é necessário se avaliar a velocidade característica e fluxos da propriedade ϕ nas interfaces, que no caso de sistemas de equações se tornam uma matriz e um vetor respectivamente. Essa tarefa pode ser complicada e muitas vezes cara de ser avaliada computacionalmente, além de ser uma provável fonte de erros. Os esquemas de Lax-Wendroff de dois passos conseguem evitar esse procedimento tornando-os simples e rápidos de serem avaliados. Dois desses esquemas são apresentados a seguir.

3.4.1 Esquema de Richtmyer e Morton

Richtmyer e Morton (1967) introduziram a base dos esquemas de dois passos, *predictor and corrector* (predição e correção). Em cada passo, são utilizados diferentes esquemas, de forma que sua combinação resulte num esquema de alta ordem. Usando a terminologia de equações diferenciais parciais, esse esquema pode ser interpretado como um esquema Runge-Kutta de dois estágios (Anderson *et al.*, 1992, Cap.11). Ele é escrito da seguinte forma,

$$\phi_p^{n+1} = \phi_p^n + \Delta t \frac{\partial \phi}{\partial t} \bigg|_p^{n+\frac{1}{2}} + O(\Delta t^3) \quad (3.23)$$

onde

$$\phi_p^{n+\frac{1}{2}} = \phi_p^n + \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial \phi}{\partial t} \bigg|_p^n \quad (3.24)$$

Substituindo a Eq.(3.16) nas Eqs.(3.23 e 3.24) e aplicando a discretização em diferenças centrais se obtém um esquema instável. Para estabilizá-lo é feito um procedimento equivalente ao esquema de Lax-Friedrichs (Eq. 3.11) no passo *predictor*, Eq.(3.25). Como é necessário apenas primeira ordem na Eq.(3.24) para se garantir segunda ordem de precisão na Eq.(3.23) esse procedimento pode se aplicado sem problemas, resultando em

$$\phi_p^{n+\frac{1}{2}} = \frac{\phi_E^n + \phi_W^n}{2} - \frac{\Delta t}{2} \frac{f_E^n - f_W^n}{2\Delta x} \quad (3.25)$$

$$\phi_p^{n+1} = \phi_p^n - \Delta t \frac{f_E^{n+\frac{1}{2}} - f_W^{n+\frac{1}{2}}}{2\Delta x} \quad (3.26)$$

Observando as Eqs.(3.25 e 3.26) pode-se perceber que as propriedades e fluxos são avaliados diretamente nos nós, onde seus valores são conhecidos. Na figura 3.4 pode-se perceber a diferença que surge para o problema não-linear. A dissipação artificial introduzida no passo *predictor* foi suficiente para satisfazer a condição de entropia para esse problema.

3.4.2 Esquema de MacCormack

O esquema de MacCormack é a versão mais popular de dois passos da família dos esquemas Lax-Wendroff. Nele a equação (3.15) é reescrita da seguinte forma

$$\phi_p^{n+1} = \frac{1}{2}\phi_p^n + \frac{1}{2} \underbrace{\left[\phi_p^n + \Delta t \frac{\partial \phi}{\partial t} \bigg|_p^n \right]}_{\phi^{n+1}} + \frac{1}{2} \left\{ \Delta t \frac{\partial}{\partial t} \underbrace{\left[\phi_p^n + \Delta t \frac{\partial \phi}{\partial t} \bigg|_p^n \right]}_{\phi^{n+1}} \right\} + O(\Delta t)^3 \quad (3.27)$$

Define-se um tempo intermediário como sendo,

$$\overline{\phi_p^{n+1}} = \phi_p^n + \Delta t \left. \frac{\partial \phi}{\partial t} \right|_p \quad (3.28)$$

Após substituir as derivadas temporais usando a Eq.(3.16), uma discretização a montante e a jusante é aplicada nos passos *predictor* e *corrector*, respectivamente (Eqs. 3.27 e 3.28). Essa ordem não é fixa, podendo ser alterada. Em geral, para se obter uma resolução um pouco melhor em descontinuidades, o passo *predictor* deve ser feito na direção de propagação da descontinuidade (Anderson *et al.* 1984, Cap.4). Essa observação não pode ser seguida num algoritmo que pretende ser geral. O esquema resultante pode ser escrito de forma a mostrar a simetria entre os passos *predictor* e *corrector* (Hirsch, 1988, Cap.17)

$$\overline{\phi_p^{n+1}} = \phi_p^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} (f_E^n - f_p^n) \quad (3.29)$$

$$\overline{\phi_p^{n+1}} = \phi_p^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} (f_p^{n+1} - f_W^{n+1}) \quad (3.30)$$

$$\phi_p^{n+1} = \frac{1}{2} (\overline{\phi_p^{n+1}} + \overline{\phi_p^{n+1}}) \quad (3.31)$$

A segunda ordem no tempo é garantida na Eq.(3.27), enquanto que a segunda ordem no espaço pelas Eqs.(3.29, 3.30, 3.31). A idéia por trás dessas equações é o cancelamento dos erros de truncamento de primeira ordem. Isso fica mais transparente ao se analisar os erros de truncamento dos termos convectivos de cada passo (Eqs. 3.29 e 3.30).

$$\frac{f_E - f_p}{\Delta x} = \left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_p + \frac{\Delta x}{2} \left. \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \right|_p + \frac{\Delta x^2}{6} \left. \frac{\partial^3 f}{\partial x^3} \right|_p + O(\Delta x^3) \quad (3.32)$$

$$\frac{f_p - f_W}{\Delta x} = \left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_p - \frac{\Delta x}{2} \left. \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \right|_p + \frac{\Delta x^2}{6} \left. \frac{\partial^3 f}{\partial x^3} \right|_p + O(\Delta x^3) \quad (3.33)$$

Devido às não-linearidades não se pode classificar perfeitamente o termo de primeira ordem nas Eqs.(3.32 e 3.33) como uma difusão numérica, no entanto, seu efeito é semelhante (figura 3.4). O esquema apresenta um comportamento semelhante ao de Lax-Wendroff.

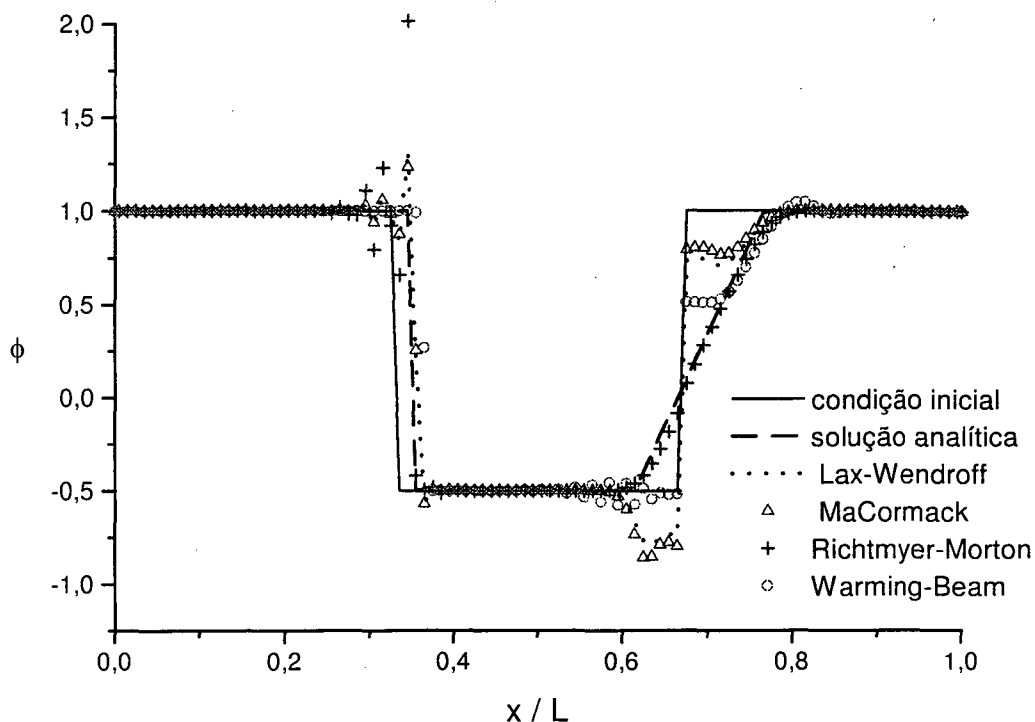


Figura 3.4 - Comportamento dos esquemas de maior ordem para equação de Burgers.

3.5 Esquema de Warming e Beam

O esquema *upwind* de segunda ordem foi obtido por Warming e Beam (1976) a partir de uma modificação do esquema de MacCormack (Eqs. 3.29, 3.30 e 3.31). Ao invés de trocar de esquema entre os passos *predictor* e *corrector* (Eqs. 3.29 e 3.30), o esquema mantém uma ponderação à montante em ambos os passos. Esse procedimento não é suficiente para se eliminar os erros de truncamento de primeira ordem (Eq. 3.33), uma vez que eles se somam ao invés de se anularem. Para obter-se segunda ordem de precisão no espaço é preciso introduzir um termo de oscilação numérica de módulo igual à difusão numérica introduzida nos passos *predictor* e *corrector*. Escrevendo os passos como no esquema de MacCormack as Eqs.(3.29 e 3.31) são substituídas por

$$\overline{\phi_p^{n+1}} = \phi_p^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} (f_p^n - f_w^n) \quad (3.34)$$

$$\phi_p^{n+1} = \frac{1}{2} \left(\overline{\phi_p^{n+1}} - \overline{\phi_p^{n+1}} \right) - \frac{\Delta t}{\Delta x} (f_p^n - 2f_w^n + f_{ww}^n) \quad (3.35)$$

respectivamente. Para um problema linear o esquema se reduz a

$$\phi_p^{n+1} = \phi_p^n - v(\phi_p^n - \phi_w^n) + \frac{v}{2}(v-1)(\phi_p^n - 2\phi_w^n + \phi_{ww}^n) \quad (3.36)$$

Comparando com a Eq.(3.20) percebe-se que o fluxo antidifusivo do esquema de Warming e Beam (1976) é avaliado um ponto à montante. Esse esquema apesar de ser semelhante ao esquema de MacCormack não pode ser considerado como pertencente à família de esquemas de Lax-Wendroff pois não aplica diferença central no espaço. O esquema linear de Warming e Beam (1976) é o único esquema *upwind* de segunda ordem espacial e temporal explícito baseado em apenas três pontos vizinhos e sua equação modificada (Anderson *et al.*, 1984, Cap.4) fica,

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + a \frac{\partial \phi}{\partial x} = a \frac{(\Delta x)^2}{6} (1-v)(2-v) \frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3} - \frac{a(\Delta x)^3}{8} v(1-v)^2(2-v) \frac{\partial^4 \phi}{\partial x^4} + O(\Delta x^4) \quad (3.37)$$

O limite de estabilidade para esse esquema é, $0 \leq v \leq 2$, e indica a forma direcional de avaliação dos fluxos. Quando $v = 1$ os erros de truncamento se anulam como nos esquemas anteriores. Na figura 3.3 e figura 3.4 o esquema demonstra um ganho de estabilidade em relação aos demais métodos de segunda ordem. A descontinuidade é bem capturada, não há violação de condição de entropia e pequenas oscilações surgem antes e depois da rarefação.

3.6 Esquema de Dissipação Artificial de Jameson

O esquema de Jameson *et al.* (1981) é um esquema de integração independente no tempo e espaço. Ele tem em comum com os esquemas de Lax-Wendroff a discretização espacial por diferenças centrais enquanto que no tempo é aplicado, independentemente, o método explícito Runge-Kutta de quatro passos. Ele foi desenvolvido no método de volumes finitos para resolver as equações de Euler,

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V U dV + \oint_S \bar{F}(U) \cdot d\bar{S} = 0 \quad (3.38)$$

para um escoamento unidimensional os vetores U e $\bar{F}(U)$, são escritos como,

$$U = \begin{Bmatrix} \rho \\ \rho u \\ E \end{Bmatrix} \quad \bar{F}(U) = \begin{Bmatrix} \rho u \\ \rho u u + P \\ (E + P) \cdot u \end{Bmatrix} \quad (3.39)$$

onde ρ é a massa específica, u , a velocidade, ρu , a quantidade de movimento linear em x , P , a pressão estática e, E , a energia total por unidade de volume. A pressão estática para um gás ideal se relaciona com as variáveis do problema através da equação de estado definida por,

$$P = (\gamma - 1) \left(E - \frac{1}{2} \rho u^2 \right) \quad (3.40)$$

onde, para o ar, $\gamma = 1,4$.

Após a integração da Eq.(3.38) nos volumes de controle, o sistema de equações diferenciais parciais no tempo-espaço se torna um sistema de equações diferenciais ordinárias no tempo (Eq. 3.41) permitindo dessa forma a aplicação do método de Runge-Kutta. A partir desse passo a propriedade U_P representa o valor médio da propriedade no volume de controle armazenada no nó “P” (figura 2.4).

$$\frac{dU_P}{dt} = -\frac{1}{V_P} Q_P \quad (3.41)$$

$$Q_P = [\bar{F} \cdot \bar{S}]_e - [\bar{F} \cdot \bar{S}]_w \quad (3.42)$$

$$[\bar{F} \cdot \bar{S}]_e = \bar{F}(U_e) \cdot \bar{S}_e \quad U_e = \frac{1}{2}(U_E + U_P) \quad (3.43)$$

O esquema de diferença central aplicado para avaliar os fluxos na face (Eqs. 3.42 e 3.43) é instável pois não possui nenhum termo dissipativo embutido na sua discretização, podendo dar origem a campos do tipo “*tabuleiro de xadrez*”. Esta ausência de dissipação impede que o esquema convirja para soluções de regime permanente mesmo em regiões suaves. Afim de evitar esse problema, termos dissipativos de quarta ordem são introduzidos por adição direta de fluxos dissipativos (Eqs. 3.44 e 3.45) mantendo assim a forma conservativa do método de volumes finitos. Nas regiões de descontinuidades, no entanto, esses termos não são suficientes para impedir o surgimento de oscilações sendo então necessário introduzir uma dissipação mais forte através de termos difusivos de segunda ordem. Esses termos são armazenados nas faces (Eq. 3.46).

$$\frac{dU_P}{dt} = -\frac{1}{V_P} [Q_P - D_P] \quad (3.44)$$

$$D_P = d_e - d_w \quad (3.45)$$

$$d_e = \frac{\Delta V}{\Delta t} \left[\varepsilon_e^{(2)} (U_E - U_P) - \varepsilon_e^{(4)} (U_{EE} - 3U_E + 3U_P - U_w) \right] \quad (3.46)$$

A introdução dos termos de segunda e quarta ordem é feita de forma automática através de um sensor de choque (Eq. 3.47) que é avaliado de acordo com o campo de pressão. Os coeficientes de dissipação numérica $\varepsilon^{(2)}$ e $\varepsilon^{(4)}$ variam de magnitude conforme a região da solução (Eqs 3.48 e 3.49) sendo avaliados em função do sensor de choque, seguindo a notação utilizada por Jameson *et al.* (1981), ν , (Eq. 3.47). Os coeficientes $\varepsilon^{(2)}$ e $\varepsilon^{(4)}$ são de segunda e “zero” ordem, respectivamente, em regiões suaves, sendo que o primeiro muda para ordem “zero” em regiões de descontinuidades tornando o esquema de primeira ordem. Valores típicos de k_2 e k_4 adotados por Jameson *et al.* (1981) são $1/4$ e $1/256$ respectivamente.

$$V_P = \left| \frac{P_E - 2P_P + P_W}{P_E + 2P_P + P_W} \right| \quad (3.47)$$

$$\varepsilon_e^{(2)} = k_2 \max(V_{EE}, V_E, V_P, V_W) \quad (3.48)$$

$$\varepsilon_e^{(4)} = \max(0, k_4 - \varepsilon_e^{(2)}) \quad (3.49)$$

Somente em malhas sem grandes variações os termos dissipativos de segunda e quarta ordem (Eqs. 3.45 e 3.46) coincidem com as expressões numéricas das derivadas de segunda e quarta ordem. Para malhas irregulares, entretanto, esses termos não se modificam contrariando nossa expectativa. Esse fato pode ser explicado por dois motivos (Anderson *et al.*, 1992, Cap.11): eles não foram desenvolvidos para simular uma dissipação física. O objetivo desses termos é apenas o de eliminar as oscilações espúrias.

O esquema Runge-Kutta de quatro estágios utilizados por Jameson *et al.* (1981) é de apenas segunda ordem. Apesar disso, por ser possível de ser obtido por um esquema de dois estágios, o esquema de Jameson consegue com os quatro estágios e outras técnicas um aumento do CFL limite, uma restrição dos esquemas explícitos.

Fazendo uma análise em uma malha regular, percebe-se que o esquema é de terceira ordem em regiões suaves e de primeira ordem em regiões de discontinuidades. Essa diminuição na ordem é necessária para evitar o surgimento de oscilações. Maiores detalhes podem ser encontrados em Jameson e Mavriplis (1986) e Bortoli (1995).

3.7 Esquema de Interpolação Upwind

O UDS quando usado como esquema de interpolação no método de volumes finitos apresenta resultados semelhantes ao esquema de Courant *et al.* (1952). Entretanto, um enfoque diferente é dado para os termos convectivos em problemas não-lineares. No método de volumes finitos esses termos são tratados como sendo o transporte de uma propriedade qualquer por um fluxo de massa, podendo então ser escritos na seguinte forma

$$\frac{\partial(\rho u \phi)}{\partial x} = \frac{\partial(\dot{m} \phi)}{\partial x} \quad (3.50)$$

Após a integração do termo convectivo (Eq. 3.50) na superfície do volume de controle, deve-se avaliar os termos entre parênteses nas faces (Eq. 3.51). Pelo novo enfoque dado a esse termo a ordem do esquema numérico fica determinado apenas pelo esquema de interpolação da propriedade podendo-se então avaliar o fluxo de massa simplesmente por uma média.

$$\frac{1}{V} \int_S \frac{\partial(\rho u \phi)}{\partial x} dS = \frac{\dot{m}_e \phi_e - \dot{m}_w \phi_w}{\Delta x} \quad (3.51)$$

Substituindo o valor da propriedade na face por suas correspondentes expressões em série de Taylor, supondo $\dot{m} > 0$, encontrar-se-á

$$\phi_e = \phi_p + \left. \frac{\Delta x}{2} \frac{\partial \phi}{\partial x} \right|_p + \left. \frac{\Delta x^2}{8} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \right|_p + O(\Delta x^3) \quad (3.52)$$

Para simplificar sem prejudicar a análise, considere os fluxos constantes (Maliska, 1995, Cap.5) e substitua a Eq.(3.52) na Eq.(3.51), obtendo-se

$$\begin{aligned} \frac{\dot{m}(\phi_e - \phi_w)}{\Delta x} &= \frac{\dot{m}(\phi_p - \phi_w)}{\Delta x} + \frac{\dot{m}\Delta x}{2} \left[\left. \frac{\partial \phi}{\partial x} \right|_p - \left. \frac{\partial \phi}{\partial x} \right|_w \right] \\ &+ \frac{\dot{m}\Delta x^2}{8} \left[\left. \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \right|_p - \left. \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \right|_w \right] + \dots \end{aligned} \quad (3.53)$$

Fazendo o limite para $\Delta x \rightarrow 0$ na Eq.(3.53) obtém-se uma expressão equivalente da Eq.(3.50) para um esquema de interpolação *upwind*. Isolando-se o primeiro termo do lado esquerdo, encontra-se,

$$\left. \frac{\partial(\dot{m}\phi)}{\partial x} \right|_{uds} = \frac{\partial(\dot{m}\phi)}{\partial x} - \frac{\dot{m}\Delta x}{2} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} - \frac{\dot{m}\Delta x^2}{8} \frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3} + O(\Delta x^3) \quad (3.54)$$

Passando-se os erros de truncamento da Eq.(3.54) para o lado direito da igualdade percebe-se a presença de uma difusão de primeira ordem introduzida pelo esquema cujo coeficiente de difusão numérica é dado por

$$\Gamma_{num} = \frac{\dot{m}\Delta x}{2} \quad (3.55)$$

Para o problema linear esse esquema de interpolação equivale ao esquema UDS (figura 3.1). Testes numéricos realizados para o problema não-linear apresentaram oscilações tanto no choque como na rarefação. Isso pode ser confirmado facilmente com um simples cálculo manual. Questiona-se porém a validade da Eq.(2.12) para esse teste, uma vez que para problemas de mecânica dos fluidos, para onde os esquemas de interpolação foram desenvolvidos, até hoje não se tem conhecimento que esse problema tenha sido reportado. Por esse motivo, os esquemas de interpolação serão testados no final desse trabalho no problema da cavidade quadrada.

3.8 Esquema de Interpolação Upwind de Segunda Ordem

O esquema de interpolação *upwind* de segunda ordem é obtido a partir do esquema de Warming e Beam (1976) quando se considera apenas a parcela responsável pela precisão

espacial. O fluxo numérico conservativo (Eqs. 2.17, 2.18 e 2.19) para o esquema *upwind* de segunda ordem linear (Eq. 3.36) é dado por

$$f_e = a \left[\frac{3}{2} \phi_P - \frac{1}{2} \phi_W \right] - \frac{\lambda a^2}{2} (\phi_P - \phi_W) \quad (3.56)$$

O primeiro termo da Eq.(3.56) é de segunda ordem no espaço enquanto que o segundo é uma correção temporal de segunda ordem do primeiro. Para o esquema de interpolação esse último termo é desconsiderado, resultando em

$$\phi_e = \frac{3}{2} \phi_P - \frac{1}{2} \phi_W \quad (3.57)$$

Analisando-se os erros de truncamento da Eq.(3.57) para uma malha regularmente espaçada encontra-se,

$$\phi_{2up} = \phi_e - \frac{3\Delta x^2}{8} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} - \frac{\Delta x^3}{4} \frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3} - \frac{13\Delta x^4}{128} \frac{\partial^4 \phi}{\partial x^4} + O(\Delta x^5) \quad (3.58)$$

Substituindo a Eq.(3.58) na Eq.(3.51) e fazendo as mesmas considerações da Eq.(3.53) obter-se-á a expressão equivalente dos termos convectivos para um esquema *upwind* de segunda ordem (espacial), resultando em

$$\left. \frac{\partial (\dot{m}\phi)}{\partial x} \right|_{\substack{\text{upwind} \\ 2^{\text{a}} \text{ ordem}}} = \frac{\partial (\dot{m}\phi)}{\partial x} - \frac{3\dot{m}\Delta x^2}{8} \frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3} - \frac{\dot{m}\Delta x^3}{4} \frac{\partial^4 \phi}{\partial x^4} - \frac{13\dot{m}\Delta x^4}{128} \frac{\partial^5 \phi}{\partial x^5} + O(\Delta x^5) \quad (3.59)$$

A Eq.(3.59) apresenta como primeiro termo do erro de truncamento uma oscilação numérica de segunda ordem. Esse esquema corresponde a uma extrapolação linear da propriedade na face a partir dos dois volumes à montante conforme ilustrado na figura 3.5.

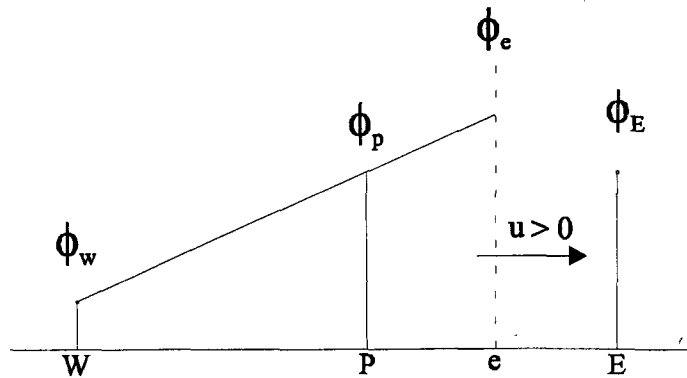


Figura 3.5 - Esquema de interpolação *upwind* de segunda ordem , extrapolação linear.

A extrapolação não leva em consideração a informação da propriedade do volume a jusante. Isso é um erro potencial do esquema de interpolação que irá avaliar propriedade fora da faixa dos valores das propriedades dos nós vizinhos nas regiões de fortes gradientes.

3.9 Esquema de Interpolação QUICK

O esquema QUICK foi introduzido por Leonard (1979a) procurando reunir as vantagens dos esquemas a montante (estabilidade, monotonicidade) e dos esquemas centrados (resolução). Nesse esquema assume-se que a propriedade possui uma distribuição quadrática (figura 3.6) ao longo das linhas coordenadas.

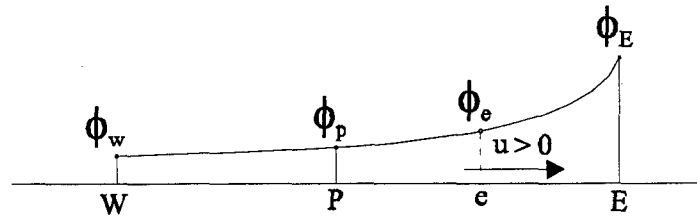


Figura 3.6 - Perfil quadrático assumido pelo QUICK.

Para se avaliar a propriedade ϕ na face ajusta-se uma parábola em três nós consecutivos: dois a montante e um a jusante. Para $u > 0$ encontra-se

$$\phi_e = \frac{1}{2}(\phi_p + \phi_E) - \frac{1}{8}(\phi_E - 2\phi_p + \phi_w) \quad (3.60)$$

Fazendo uma análise do erro de truncamento da Eq.(3.60) para uma malha regular, encontra-se

$$\phi_{quick} = \phi_e + \frac{\Delta x^3}{16} \frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3} - \frac{3\Delta x^4}{128} \frac{\partial^4 \phi}{\partial x^4} + O(\Delta x^5) \quad (3.61)$$

Substituindo a Eq.(3.61) na Eq.(3.51) e fazendo as mesmas considerações feitas para a Eq.(3.53) obter-se-á a expressão equivalente dos termos convectivos para o esquema de interpolação QUICK como sendo,

$$\left. \frac{\partial(\dot{m}\phi)}{\partial x} \right|_{QUICK} = \frac{\partial(\dot{m}\phi)}{\partial x} + \frac{\dot{m}\Delta x^3}{16} \frac{\partial^4 \phi}{\partial x^4} - \frac{3\dot{m}\Delta x^4}{128} \frac{\partial^5 \phi}{\partial x^5} + O(\Delta x^5) \quad (3.62)$$

A Eq. (3.62) mostra que o esquema possui terceira ordem (em malhas uniformes) e o primeiro termo do erro de truncamento é a uma dissipação numérica. A aproximação por uma quadrática é mais realística que a aproximação linear. O resultado disso é uma estabilidade para uma faixa de número de Peclet maior do que a obtida com diferenças centrais. Essa estabilidade, no entanto, não é infinita como no esquema UDS, porém é maior que o esquema de interpolação *upwind* de segunda ordem. Em regiões de descontinuidade os termos oscilatórios passam a

dominar a solução. Assim como no esquema de Jameson (1981), a dissipação numérica, nesse caso intrínseca, se mostra insuficiente nas regiões de discontinuidades. Essas oscilações estão associadas à avaliação da propriedade na face fora dos limites formado pelo valor da propriedade dos nós vizinhos (figura 3.7).

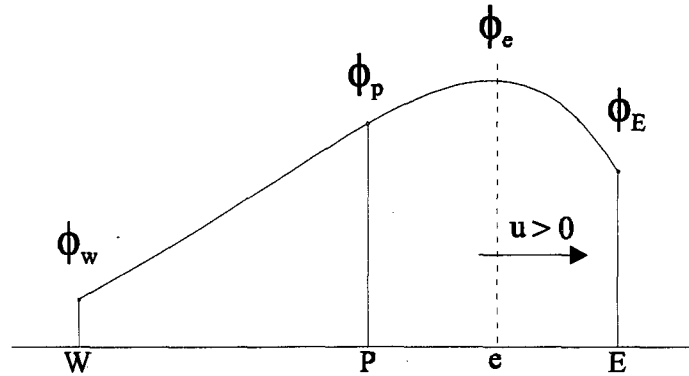


Figura 3.7 - Exemplo de avaliação da propriedade fora do intervalo formado pelas propriedades vizinhas.

Maiores detalhes e melhorias a respeito desse esquema de interpolação podem ser encontrados em Hayase *et al.* (1992).

3.10 Esquemas Híbridos de Interpolação

Como o próprio nome diz, os esquemas de interpolação híbridos variam de esquema ao longo da solução. Procura-se dessa forma aplicar os esquemas apropriados com o escoamento em cada região da solução para maximizar a resolução e estabilidade.

Os valores das propriedades e suas derivadas nas faces dos volumes de controle podem ser escritos de uma maneira geral utilizando coeficientes α e β , respectivamente, dados por

$$\phi_e = \left(\frac{1}{2} + \alpha_e \right) \phi_P + \left(\frac{1}{2} - \alpha_e \right) \phi_E \quad (3.63)$$

$$\left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_e = \beta_e \frac{(\phi_E - \phi_P)}{\Delta x} \quad (3.64)$$

Fixando os valores de α e β pode-se recuperar esquemas como o *upwind* ($\alpha = \pm 0,5$ e $\beta = 0$) e diferença central ($\alpha = 0$ e $\beta = 1$). Nos esquemas híbridos, α e β variam em função do número de Peclet.

O esquema de interpolação WUDS (Raithby e Torrance, 1974), obtém a função de interpolação a partir da solução analítica de um problema convectivo-difusivo em regime permanente sem termos fontes, dado por

$$\frac{\partial (\rho u \phi)}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma \phi \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) \quad (3.65)$$

Seria interessante que o problema utilizado para obter a função de interpolação, tivesse todos os termos da equação que se quer resolver. Caso isso fosse possível, para se obter a função de interpolação ter-se-ia antecipadamente a solução do próprio problema (Maliska, 1995, Cap.5). Aplicando a solução analítica da Eq.(3.65) aos coeficientes α e β (Eqs. 3.63 e 3.64), se obtém

$$\alpha_e = \frac{1}{2} - \frac{e^{\frac{Pe}{2}} - 1}{e^{Pe} - 1} \quad (3.66)$$

$$\beta_e = Pe \frac{e^{\frac{Pe}{2}}}{e^{Pe} - 1} \quad (3.67)$$

que envolvem exponenciais. Devido ao elevado número de vezes que as Eqs.(3.66 e 3.67) devem ser avaliadas, um grande esforço computacional é exigido para isso. Como a Eq.(3.65), para um problema geral, não é uma aproximação exata para o fluxo na fronteira do volume de controle, mesmo usando as Eqs.(3.66 e 3.67) obter-se-á apenas uma aproximação para a propriedade na fronteira. Esse argumento é forte o bastante para se aceitar o emprego de expressões aproximadas para as Eqs.(3.66 e 3.67) sem diminuir sua precisão e aumentando a eficiência do esquema de interpolação. Dessa forma utiliza-se as seguintes expressões para α e β (Raithby, 1976)

$$\alpha_e = \frac{Pe_{\Delta x}^2}{(10 + 2Pe_{\Delta x}^2)} \quad (3.68)$$

$$\beta_e = \frac{(1 + 0,005Pe_{\Delta x}^2)}{(1 + 0,05Pe_{\Delta x}^2)} \quad (3.69)$$

O emprego do esquema de interpolação WUDS leva a obtenção de coeficientes positivos, exceto em alguns modelos de turbulência, levando a matrizes diagonalmente dominantes. Isso permite o uso de algoritmos de solução de matrizes mais “fracos” que de outros esquemas de interpolação. Sua função de interpolação evita o surgimento de oscilações ao tender para o esquema de interpolação *upwind* para números de Peclet elevados. Esse comportamento provoca a introdução excessiva de difusão numérica (Eq. 3.54), causando o amortecimento de descontinuidades.

Sabe-se numericamente que os esquemas centrados apresentam boa resolução e que oscilam em regiões de descontinuidades. Por esse raciocínio seria interessante que a mudança para um esquema de primeira ordem seja feita apenas nessas regiões.

3.11 Algumas observações

A análise das equações modificadas dos esquemas numéricos comentados demonstra uma correspondência entre erros de truncamento e o comportamento da solução. Enquanto que para problemas lineares essa análise é completa, para problemas não-lineares essa análise apenas fornece informações sobre casos limites. A difusão numérica quando existente é um termo de primeira ordem. Por esse motivo ela domina a solução provocando amortecimentos em regiões de descontinuidades.

A discretização por diferenças centrais de derivadas de ordem ímpar, como os termos convectivos, gera esquemas instáveis. O esquema de Jameson *et al.* (1981) introduz diretamente termos dissipativos para estabilizá-lo. No esquema de interpolação QUICK (Leonard, 1979a) a dissipação artificial (termo de derivada quarta) está embutida no esquema. A dissipação artificial (termo contendo derivada quarta) é necessária em regiões suaves para permitir a convergência em regime permanente. Nas descontinuidades esse termo provoca oscilações, sendo necessário introduzir difusão artificial para evitá-las. Numa análise de Von Neumann esses termos são necessários para evitar erros de baixa e alta frequência respectivamente (Hirsch, 1988, Cap.8).

Uma forma de se explicar esse comportamento inesperado do termo dissipativo associado à derivada de quarta ordem seria a hipótese de continuidade assumida na expansão em série de Taylor. Numa descontinuidade essa continuidade é perdida após a mesma, portanto, qualquer discretização envolvendo pontos de ambos os lados levará a resultados incorretos. O esquema UDS leva em consideração apenas um dos pontos vizinhos, dessa forma a propriedade será sempre avaliada dentro dos limites (figura 3.7). Esquemas *upwind* com mais pontos podem avaliar a propriedade fora dos limites. Para que isso não aconteça deve ser introduzida alguma limitação envolvendo o valor da propriedade do ponto após a descontinuidade. A dominância do erro de truncamento de forma dissipativa na equação modificada indica que alguma discretização de natureza *upwind* foi utilizada.

Para problemas lineares os esquemas de primeira ordem assim como os de segunda ordem aqui tratados diminuem a dissipação e oscilação numérica respectivamente à medida que $\nu \rightarrow 1$. Quando $\nu = 1$ as soluções numéricas coincidem com a solução do problema. Nesses casos, os erros de truncamento se anulam e o esquema numérico adotado na discretização é a própria solução do problema. No caso não-linear essa tendência se mantém, porém a análise do CFL não é absoluta, uma vez que a velocidade característica (Eq. 2.5) não é constante ao longo do domínio.

4 ESQUEMAS TVD

Nesse capítulo será apresentado a dedução dos critérios gerais para construção de esquemas TVD (*Total Variation Diminishing*). Duas categorias são apresentadas: TVD via fluxo modificado e TVD via limitador de fluxo. Em seguida apresenta-se algumas modificações para aplicação do esquema em sistemas de equações de forma segregada.

Os esquemas TVD são do tipo *shock-capturing*, próprios para problemas onde não se sabe, a princípio, a posição dos choques ou descontinuidades. Para isso o esquema deve satisfazer a condição de entropia (Eq. 2.11), ter pelo menos segunda ordem de precisão em regiões suaves e ter boa captura de descontinuidades.

O esquema TVD deve variar de esquema numérico ao longo do domínio computacional para poder produzir soluções de alta resolução. A principal diferença do comportamento desse esquema com os esquemas de interpolação híbridos, é que o TVD só muda para esquemas de primeira ordem nas regiões imediatamente vizinhas de descontinuidades. Para que essas regiões sejam identificadas, é necessário que as parcelas responsáveis pela introdução de dissipação ou oscilação numérica sejam funções de termos não-lineares, sensíveis a essas variações como a velocidade característica ou razão de gradientes da variável, que serão apresentados mais à frente nesse capítulo.

A principal característica que difere o TVD de outros esquemas de alta resolução é que ele se reduz à primeira ordem em regiões de descontinuidades. Como a ordem do esquema se altera de acordo com a solução, convencionou-se a ordem dos esquemas TVD como a ordem do esquema nas regiões suaves.

4.1 Construção de Esquemas TVD

Considere um problema de valor inicial para uma lei de conservação hiperbólica (Eqs. 2.2 e 2.6), discretizada de forma conservativa (Eqs. 2.17 e 2.18) e de fluxo numérico consistente (Eq. 2.19). Considera-se a condição inicial como sendo de variação total (*Total Variation*, TV) limitada. Define-se variação total de uma função, $\phi = \{\phi_p\}$, como sendo

$$TV(\phi) \equiv \sum_{p=-\infty}^{\infty} |\Delta_{\epsilon} \phi| \quad (4.1)$$

onde

$$\Delta_e \phi = \phi_E - \phi_P = \Delta_{j+1/2} \phi = \phi_{j+1} - \phi_j \quad (4.2)$$

Um esquema é tido como de variação total não-crescente (TVNI, *Total Variation Non-Increasing*) (Harten, 1983) se

$$TV(\phi(t_2)) \leq TV(\phi(t_1)) \quad \text{para todo} \quad t_2 \geq t_1 \quad (4.3)$$

Embora a definição de esquema TVNI permita que a variação total (Eq. 4.1) permaneça constante ao longo do tempo, os primeiros trabalhos que utilizaram essa definição (Yee e Kutler, 1983; Yee, 1985) forçavam sua diminuição e por isso ficaram conhecidos como *Total Variation Diminishing* (TVD). Harten (1983) provou um teorema estabelecendo uma hierarquia entre os conceitos (monotonicidade, preservação de monotonicidade e TVD):

- i) Um esquema monótono é TVD.
- ii) Um esquema TVD preserva a monotonicidade.

Deve-se observar que um esquema que preserva a monotonicidade não é, necessariamente, um esquema monótono. Para esquemas lineares a condição de preservação da monotonicidade recai na mesma definição de monotonicidade. Dessa forma se conclui que **qualquer esquema linear TVD é monótono e portanto de primeira ordem.**

Considere a Eq.(2.20) escrita na forma “delta”

$$L \phi_p'' = \phi_p'' + C_{+e} \Delta_e \phi - C_{-w} \Delta_w \phi \quad (4.4)$$

onde Δ_e está definido na Eq.(4.2) e os coeficientes “C” são funções da propriedade nos nós vizinhos. Para um esquema de três pontos esses coeficientes serão funções dos pontos imediatamente vizinhos à face,

$$C_{+e} = C_+(\phi_P, \phi_E) \quad C_{-w} = C_-(\phi_W, \phi_P) \quad (4.5)$$

As condições suficientes nos coeficientes (Eq. 4.5) para garantir que o esquema seja TVD foram estabelecidas por Harten (1983) num lema que será transcrito abaixo.

Lema 2.2 - Sejam os coeficientes “C_±” na Eq. (4.4) que satisfazem as desigualdades:

$$\begin{aligned} C_{+e} &\geq 0 & C_{-w} &\geq 0 \\ C_{+e} + C_{-w} &\leq 1 \end{aligned} \quad (4.6)$$

Então o esquema (Eq. 4.4) é TVD.

Prova - Subtraia-se a Eq.(4.4) avaliada no ponto “E” da avaliada no ponto “P” para obter

$$\Delta_e \phi_p^{n+1} = C_{-w} \Delta_w \phi^n + (1 - C_{-e} - C_{+w}) \Delta_e \phi^n + C_{+ee} \Delta_{ee} \phi^n \quad (4.7)$$

Pela Eq.(4.6) todos os coeficientes na Eq.(4.7) são não negativos, então

$$|\Delta_e \phi_p^{n+1}| \leq C_{-w} |\Delta_w \phi^n| + (1 - C_{-e} - C_{+w}) |\Delta_e \phi^n| + C_{+ee} |\Delta_{ee} \phi^n| \quad (4.8)$$

Somando a Eq.(4.8) de $-\infty < P < \infty$ obtém-se

$$\begin{aligned} TV(\phi^{n+1}) &\equiv \sum_{P=-\infty}^{\infty} |\Delta_e \phi_p^{n+1}| \leq \sum_{P=-\infty}^{\infty} (1 - C_{-e} - C_{+w}) |\Delta_e \phi^n| \\ &\quad + \sum_{P=-\infty}^{\infty} C_{-w} |\Delta_w \phi^n| + \sum_{P=-\infty}^{\infty} C_{+ee} |\Delta_{ee} \phi^n| \\ &= \sum_{P=-\infty}^{\infty} |\Delta_e \phi_p^n| \equiv TV(\phi^n) \end{aligned} \quad (4.9)$$

que demonstra satisfazer a Eq.(4.3). A igualdade da Eq.(4.9) é obtida com a troca dos índices dos dois últimos termos do lado direito da desigualdade.

4.2 Esquema TVD de Primeira Ordem

Foi dito anteriormente que todo esquema monótono que satisfaz à condição de entropia (Eq. 2.11) é TVD porém, o inverso pode não ser, uma vez que, por definição, o esquema TVD apenas garante que a solução numérica convergida é consistente com a solução fraca da equação diferencial. É preciso introduzir outras restrições para garantir o atendimento à condição de entropia (Eq. 2.11). Para isso considere o esquema *upwind* de três pontos (Eq. 3.1) reescrito, de forma que o fluxo na Eq.(2.17) seja,

$$f_e = \frac{1}{2} \left[f_E + f_P - \frac{1}{\lambda} \psi(\lambda a_e) \Delta_e \phi \right] \quad (4.10)$$

onde a função ψ , chamada de coeficiente de viscosidade numérica, e a velocidade característica a_e são dadas por

$$\psi(x) = |x| \quad (4.11)$$

$$a_e = \begin{cases} \frac{f_E - f_P}{\phi_E - \phi_P} & \Delta_e \phi \neq 0 \\ a(\phi_P) & \Delta_e \phi = 0 \end{cases} \quad (4.12)$$

A escolha da Eq.(4.11) para coeficiente de viscosidade numérica não garante o atendimento da condição de entropia (Eq. 2.11). Particularmente, quando $x \rightarrow 0$ o esquema admite um “choque de expansão” ao invés de um leque de rarefação. Uma pequena modificação na Eq.(4.11) para valores pequenos de x é necessária para eliminar esse erro. Sendo $\varepsilon > 0$, um pequeno parâmetro positivo de correção de entropia, o novo coeficiente de viscosidade numérica fica definido como (Harten e Hyman, 1983),

$$\psi(x) = \begin{cases} |x| & x \geq \varepsilon \\ \frac{x^2 + \varepsilon^2}{2\varepsilon} & x < \varepsilon \end{cases} \quad (4.13)$$

Essa função (Eq. 4.13) é uma aproximação positiva e continuamente derivável da Eq.(4.11). Ao se trabalhar com as equações de Euler esse erro ocorre em regiões onde a velocidade local do escoamento varia em torno da velocidade sônica ou pontos de estagnação. O objetivo dessa modificação é introduzir uma difusão artificial nessas regiões para atender à condição de entropia. Harten (1983) provou que se

$$|x| \leq \psi(x) \leq 1 \quad \text{para} \quad 0 \leq |x| \leq \mu \leq 1 \quad (4.14)$$

onde μ é um número real, o esquema (Eqs. 2.17e 4.10) é TVD sob a seguinte restrição

$$\lambda \max |a_e| \leq \mu \quad (4.15)$$

4.3 Esquema TVD via Fluxo Modificado

O esquema TVD via fluxo modificado (Harten, 1983) é obtido a partir do esquema TVD de primeira ordem através de uma modificação no fluxo numérico de primeira ordem (Eq. 4.10). A equação modificada para esquemas monótonos (Harten *et al.*, 1976) apresenta como primeiro termo do erro de truncamento uma difusão numérica de primeira ordem,

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \frac{\partial f(\phi)}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{\lambda} g \right) + O(\Delta x^2) \quad (4.16)$$

onde

$$g = \Delta x \beta(\phi, \lambda) \frac{\partial \phi}{\partial x} \quad \beta \geq 0 \quad (4.17)$$

Passando a difusão numérica para o lado esquerdo da igualdade pode-se reescrever o fluxo,

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left(f(\phi) - \frac{1}{\lambda} g \right) = O(\Delta x^2) \quad (4.18)$$

Embora a equação hiperbólica (Eq. 4.16) seja resolvida com apenas primeira ordem de precisão, a equação parabólica (4.18) é resolvida com segunda ordem. A função $\frac{1}{\lambda} g$ para ser considerada um fluxo na Eq.(4.18), deve ser diferenciável em ϕ . A modificação do fluxo para

obter um esquema de segunda ordem consiste em acrescentar um fluxo antidifusivo para anular a difusão numérica natural do esquema monótono. Uma escolha natural para isso seria o zero da função¹ $\frac{1}{\lambda}g$, obtendo-se

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left(f(\phi) + \frac{1}{\lambda} g \right) = O(\Delta x^2) \quad (4.19)$$

Dessa forma a equação hiperbólica de fluxo modificado (Eq. 4.19) é resolvida com segunda ordem de precisão. Para que o esquema continue TVD é preciso que o fluxo antidifusivo tenha sua derivada em relação a ϕ limitada. O fluxo modificado proposto por Harten (1983) é dado por,

$$f_p^M = f(\phi_p) + \frac{1}{\lambda} g \quad g = g(\phi_w, \phi_p, \phi_E) \quad (4.20)$$

$$v_e^M = v_e + \gamma_e \quad \gamma_e = \begin{cases} \frac{g_E - g_p}{\phi_E - \phi_p} & \Delta_e \phi \neq 0 \\ 0 & \Delta_e \phi = 0 \end{cases} \quad (4.21)$$

$$f_e^M = \frac{1}{2} \left[f_E + f_p + \frac{1}{\lambda} (g_E + g_p - \psi(v_e + \gamma_e) \Delta_e \phi) \right] \quad (4.22)$$

onde

$$g_p = \text{minmod}(\tilde{g}_e, \tilde{g}_w) \quad (4.23)$$

$$\tilde{g}_e = \frac{1}{2} [\psi(v_e) - v_e^2] \Delta_e \phi \quad v_e = \lambda a_e \quad (4.24)$$

$$\text{minmod}(a, b) = \text{sign}(a) \cdot \max[0, \min(|a|, b \cdot \text{sign}(a))] \quad (4.25)$$

A função “minmod” (Eq. 4.25) seleciona o menor valor em módulo caso seus argumentos tenham mesmo sinal e zero, caso contrário. Essa função garante que em regiões de máximos e mínimos locais o fluxo difusivo será nulo tornando o fluxo numérico (Eq. 4.22) de primeira ordem impedindo que oscilações apareçam na solução.

Yee (1987a,b) propôs uma modificação no fluxo numérico para tornar o esquema mais eficiente reduzindo o número de operações e menos difusivo. Essa modificação pode ser escrita como,

¹ Se $y(x)$ é um zero da função $h(x)$, então, $y(x)+h(x) = 0$

$$f_e^M = \frac{1}{2} \left[f_E + f_P + \sigma(a_e)(g_E + g_P) - \psi(a_e + \gamma_e) \Delta_e \phi \right] \quad (4.26)$$

onde,

$$\sigma(a_e) = \frac{1}{2} \left[\psi(a_e) - \lambda a_e^2 \right] \quad (4.27)$$

Diferentes expressões podem ser definidas para g_P que satisfazem as condições TVD (Eq. 4.6), como, por exemplo

$$g_P = \text{minmod}(\Delta_e \phi, \Delta_w \phi) \quad (4.28)$$

$$g_P = S \max(0, \min(2|\Delta_e \phi|, S \Delta_w \phi), \min(|\Delta_e \phi|, 2S \Delta_w \phi)) \quad S = \text{sign}(\Delta_e \phi) \quad (4.29)$$

$$\gamma_e = \sigma(a_e) \begin{cases} \frac{g_E - g_P}{\phi_E - \phi_P} & \Delta_e \phi \neq 0 \\ 0 & \Delta_e \phi = 0 \end{cases} \quad (4.30)$$

Essa forma representa uma mudança na forma original de avaliar o fluxo antidifusivo g (Eq. 4.23), removendo $\sigma(a)$ de sua definição e depois incorporando-o na Eq.(4.26) como um fator de $(g_P + g_E)$ (Yee, 1987a).

4.4 Esquema TVD via Limitador de Fluxo

Outra importante categoria é a dos esquemas TVD via limitador de fluxo. Essa categoria coloca sobre uma mesma teoria diversos esquemas inicialmente desenvolvidos isoladamente (Van Leer, 1979; Roe, 1981b; Chakravarthy e Osher, 1983). Sweby (1984) partiu do esquema de segunda ordem Lax-Wendroff (Eq. 3.20) escrito na forma “delta” como sendo um esquema *upwind* acrescido de um fluxo antidifusivo, ou seja:

$$\underbrace{\phi_P^{n+1} = \phi_P^n - v \Delta_w \phi^n}_{\text{esquema upwind}} - \underbrace{\frac{1}{2}(1-v)v [\Delta_e \phi^n - \Delta_w \phi^n]}_{\text{fluxo antidifusivo}} \quad (4.31)$$

Sabe-se que o esquema de Lax-Wendroff não preserva a monotonicidade (Harten *et al.*, 1976). Observando a Eq.(4.31) percebe-se que este problema se deve ao fluxo antidifusivo que não é limitado, caso contrário ter-se-ia o esquema *upwind* (Eq. 3.2) de primeira ordem. Para que o esquema (Eq. 4.31) seja TVD é preciso limitar o fluxo antidifusivo de forma que ele atenda às condições TVD (Eq. 4.6). Isso é feito através da introdução do limitador de fluxo, ϕ (Eq. 4.33), que deve ser positivo para manter o sinal original do fluxo antidifusivo, ou seja,

$$\underbrace{\phi_p^{n+1} = \phi_p^n - \nu \Delta_w \phi^n}_{\text{esquema upwind}} - \underbrace{\frac{1}{2}(1-\nu)\nu [\varphi_e \Delta_e \phi^n - \varphi_w \Delta_w \phi^n]}_{\text{fluxo antidifusivo limitado}} \quad (4.32)$$

$$\varphi_e = \varphi(r_e) \quad (4.33)$$

Para problemas não-lineares o limitador de fluxo é uma função da razão dos fluxos antidifusivos (Sweby, 1984, 1985). No caso linear, esta função se reduz à razão dos gradientes consecutivos da propriedade na face (Eq. 4.34), dada por

$$r_e = \frac{\left. \frac{\partial \phi}{\partial x} \right|_{\text{montante}}}{\left. \frac{\partial \phi}{\partial x} \right|_{\text{face}}} \quad (4.34)$$

Avaliando a Eq.(4.34) numa malha cartesiana igualmente espaçada, para $a > 0$, na face “e” se obtém

$$r_e = \frac{\Delta_w \phi}{\Delta_e \phi} \quad (4.35)$$

Reescrevendo a Eq.(4.32) na forma da Eq.(4.4) se obtém as expressões para os coeficientes,

$$C_w = \nu \left\{ 1 + \frac{1}{2}(1-\nu)\nu \left[\frac{\varphi_e}{r_e} - \varphi_w \right] \right\} \quad D_e = 0 \quad (4.36)$$

O coeficiente D_e , atende automaticamente às condições TVD (Eq. 4.6), mas para que o coeficiente C_w atenda é preciso fazer restrições que resultam em,

$$\left| \frac{\varphi_e}{r_e} - \varphi_w \right| \leq 2 \quad (4.37)$$

Outra restrição imposta ao limitador é que em pontos extremos (máximos e mínimos locais) o esquema deve ser de primeira ordem para evitar o surgimento de oscilações, ou seja,

$$\varphi(r) = 0 \quad \text{se} \quad r \leq 0 \quad (4.38)$$

Substituindo na Eq.(4.36) obtém-se

$$0 \leq \frac{\varphi_e}{r_e} - \varphi_w \leq 2 \quad (4.39)$$

Deseja-se que a solução possua a menor quantidade de dissipação numérica possível, por isso deve-se maximizar o fluxo antidifusivo e, conseqüentemente, o limitador de fluxo, dentro dos limites TVD (Eq. 4.4). Gráficamente essas condições levam à definição da região TVD geral (figura 4.1) que contém todos os limitadores de fluxo TVD, de primeira a n-ésima ordem.

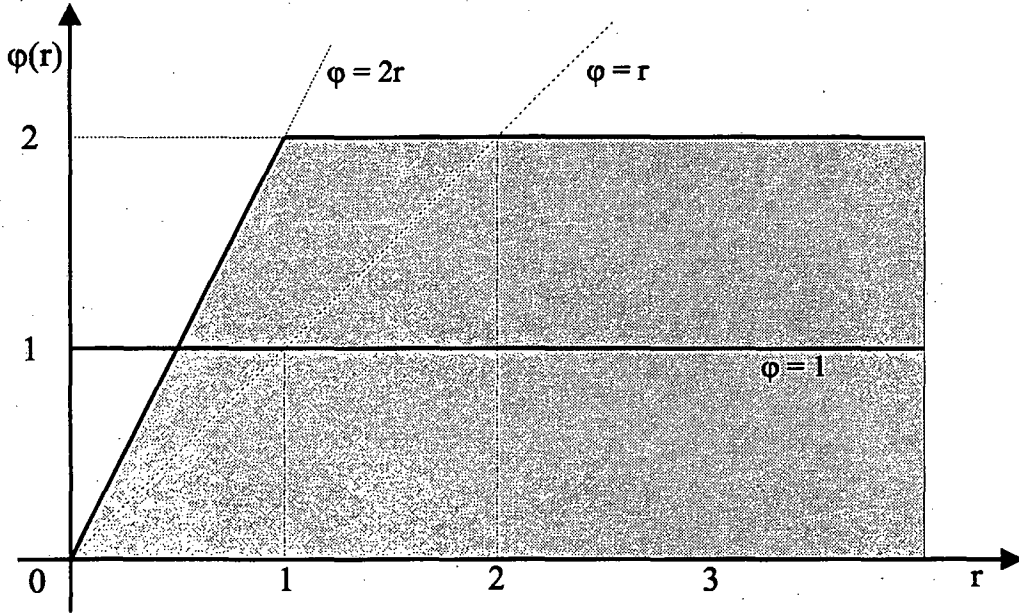


Figura 4.1- Região TVD geral.

Matematicamente essa região é definida pela expressão,

$$\varphi(r) = \min(2r, 2) \quad r \geq 0 \quad (4.40)$$

As funções limitadoras de fluxo correspondentes aos esquemas de Lax-Wendroff (Eq. 3.20), $\varphi(r) = 1$, e de Warming e Beam (Eq. 3.36), $\varphi(r) = r$, também são representados na figura 4.1. Observa-se que essas retas não pertencem à região TVD em todo o domínio.

Uma restrição que é aplicada à função limitadora de esquemas de alta ordem é que em regiões suaves, onde não há variação de gradiente, o esquema deve recair numa diferença central (Eq. 4.41) para que φ seja uma função contínua de Lipchitz, ou seja

$$\varphi(r) = 1 \quad \text{para} \quad r = 1 \quad (4.41)$$

Qualquer esquema de segunda ordem baseado nos pontos (ϕ_{WW} , ϕ_W , ϕ_P , ϕ_E) pode ser considerado como uma média ponderada entre os esquemas de Lax-Wendroff (1960) e Warming e Beam (1976), ou seja,

$$\begin{aligned} \varphi(r) &= (1 - \Theta) \cdot 1 + \Theta \cdot r \\ \varphi(r) &= 1 + \Theta(r - 1) \quad 0 \leq \Theta \leq 1 \end{aligned} \quad (4.42)$$

A Eq.(4.42) delimita a sub-região da região TVD geral (figura 4.1) que contém os limitadores de fluxo dos esquemas TVD de segunda ordem (figura 4.2) conhecida como região TVD de segunda ordem ou região TVD de Sweby. Pontos fora dessa região, $\Theta < 0$ e $\Theta > 1$, não são considerados por levarem a esquemas muito difusivos ou muito compressivos respectivamente. O efeito do primeiro é o de atenuar discontinuidades enquanto que o do segundo é o de criar discontinuidades em soluções suaves.

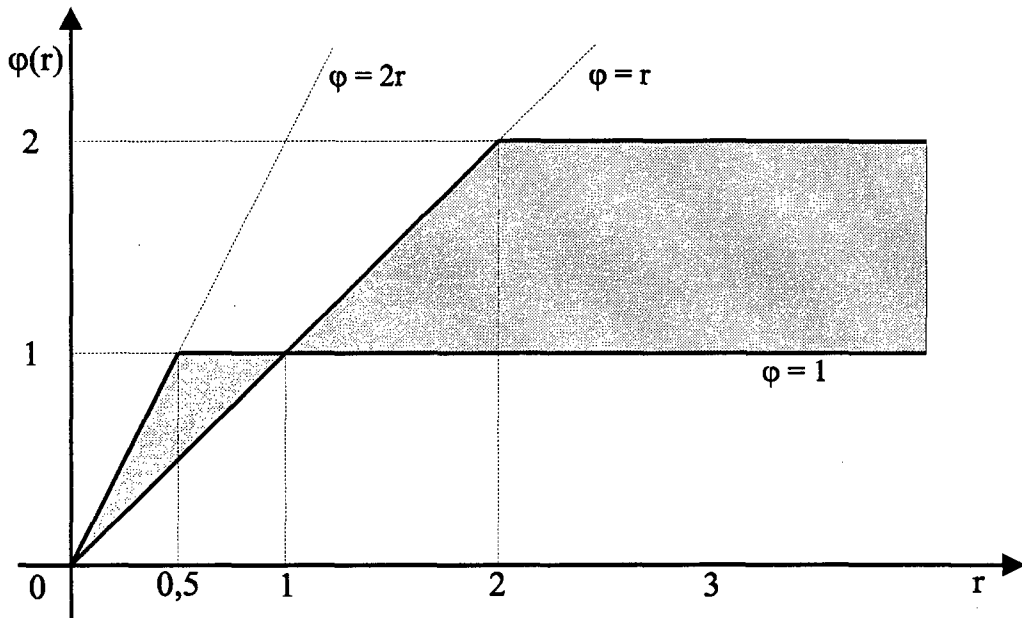


Figura 4.2 - Região TVD de segunda ordem.

Uma vez determinada a região TVD de segunda ordem (figura 4.2) a construção de esquemas TVD via limitador de fluxo fica bastante simplificada. Muitos limitadores estão disponíveis na literatura, alguns dos mais populares são:

- Limitador de Van Leer (1974)

$$\varphi(r) = \frac{|r| + r}{1 + r} \quad (4.43)$$

- “Superbee” Roe (1981b)

$$\varphi(r) = \max(0, \min(2r, 1), \min(r, 2)) \quad (4.44)$$

- “Minmod”

$$\varphi(r) = \max(0, \min(r, 1)) \quad (4.45)$$

•Limitador de Chakravarthy e Osher (1983)

$$\varphi(r) = \max(0, \min(r, \beta)) \quad 1 \leq \beta \leq 2 \quad (4.46)$$

Os limitadores “superbee” (Eq. 4.44) e “minmod” (Eq. 4.45) representam os contornos superior e inferior, respectivamente, da região TVD de segunda ordem (figura 4.2). O primeiro é tido como o mais compressivo, ou seja, é o limitador que introduz a maior quantidade de fluxo antidifusivo possível dentro dos limites TVD. Sweby(1984) observou que esse limitador pode provocar descontinuidades em regiões suaves. O limitador de Chakravarthy e Osher (Eq. 4.46), para $\beta \neq 1$, não atende a propriedade de simetria, dada por

$$\frac{\varphi(r)}{r} = \varphi\left(\frac{1}{r}\right) \quad (4.47)$$

que garante que gradientes a montante ou a jusante são tratados da mesma forma. Essa é uma propriedade desejável porém não necessária.

Rubin e Blunt (1991) com o objetivo de aplicar o esquema TVD via fluxo limitado em problemas de petróleo, cujo modelo matemático forma um sistema de equações de características parabólica-hiperbólicas, observou que esquemas do tipo Lax-Wendroff não poderiam ser aplicados em equações parabólicas. A razão para isso é que na substituição do termo temporal de segunda ordem (Eqs. 3.16 e 3.17) se utiliza a forma hiperbólica da lei de conservação (Eq. 2.2). O esquema de Lax-Wendroff é uma correção temporal do esquema de diferença central (Eqs. 3.17 e 3.18) com o objetivo de se obter segunda ordem também no tempo.

Rubin e Blunt (1991), abrindo mão da segunda ordem de precisão no tempo, o que torna o esquema de Lax-Wendroff uma diferença central, utilizaram o esquema TVD via limitador de fluxo juntamente com esquema de Euler de integração no tempo (Eq. 3.9), podendo então ser aplicado em equações hiperbólicas e parabólicas. Dessa forma, a perda de precisão temporal é compensada com a maior aplicabilidade do mesmo esquema a equações com diferentes características. O fluxo numérico desse esquema, na forma conservativa para $a > 0$ fica,

$$f_e = f_p + \frac{\varphi(r_e)}{2} (f_E - f_p) \quad (4.48)$$

onde o limitador de fluxo adotado é o limitador de Van Leer (Eq. 4.43). O limite do CFL para essa formulação é $CFL \leq \frac{1}{2}$. Devido ao esquema em que se baseiam, os esquemas de Sweby (1984) e Rubin e Blunt (1991) recaem em diferentes esquemas para mesmos valores de φ .

Tabela 4.1 - Casos particulares do esquema TVD de fluxo modificado.

$\varphi(r)$	Sweby (1984)	Rubin e Blunt (1991)
0	UDS	UDS
1	Lax e Wendroff (1960)	diferença central
r	Warming e Beam (1976)	dois pontos a montante
2	-	um ponto a jusante

4.5 Esquema TVD Simétrico

Os esquemas TVD simétricos surgiram a partir da extensão dos conceitos inicialmente desenvolvidos para esquemas de base *upwind*, para os de base centrada como a família de esquemas Lax-Wendroff (Davis, 1984). Roe (1984) generalizou o trabalho de Davis (1984) permitindo que outros esquemas pertencentes à essa classe fossem revelados. Sua forma geral para um caso linear é,

$$\begin{aligned} \phi_p^{n+1} = & \underbrace{\phi_p^n - \frac{1}{2}v(1+v)\Delta_w\phi^n - \frac{1}{2}v(1-v)\Delta_e\phi^n}_{\text{Lax-Wendroff}} \\ & - \underbrace{\frac{1}{2}|v|(1-|v|)(1-Q_w)\Delta_w\phi^n + \frac{1}{2}|v|(1-|v|)(1-Q_e)\Delta_e\phi^n}_{\text{dissipação artificial}} \end{aligned} \quad (4.49)$$

A primeira linha corresponde ao esquema de Lax-Wendroff e a linha seguinte, a um termo conservativo de dissipação artificial. Quando se compara com o esquema TVD via limitador de fluxo (Eq. 4.32) com o TVD simétrico (Eq. 4.49), percebe-se a diferença na forma com que eles preservam a monotonicidade. Enquanto que o primeiro limita o fluxo antidifusivo do esquema Lax-Wendroff, o segundo deixa-o livre e introduz uma dissipação artificial para anular seus efeitos oscilatórios. A função Q , avaliada na interface, depende de três gradientes consecutivos $\Delta_w\phi$, $\Delta_e\phi$, $\Delta_{ee}\phi$. Na Eq.(4.49) a função Q , que está forma adimensional, é função das razões de gradientes vizinhos,

$$Q_e = Q_e\left(\frac{\Delta_w\phi}{\Delta_e\phi}, \frac{\Delta_{ee}\phi}{\Delta_e\phi}\right) = Q_e(r_e^-, r_e^+) \quad (4.50)$$

Escrevendo a Eq.(4.49) na forma delta (Eq. 4.4) para $v > 0$ e $v < 0$, a determinação da função Q que atenda às condições TVD (Eq. 4.6) é bastante simplificada assumindo-se que Q e Q/r sejam sempre positivos (Roe, 1984). Com essas restrições as condições suficientes para um esquema TVD simétrico são

$$Q_e < \frac{2}{1-|v|} \quad (4.51)$$

$$\frac{Q_e}{r_e^-} < \frac{2}{|v|} \quad \frac{Q_e}{r_e^+} < \frac{2}{|v|} \quad (4.52)$$

Essa definição adimensional é problemática, para $\Delta_e\phi = 0$, por gerar uma indeterminação na definição de r_e^+ e r_e^- (Yee, 1987b). Para evitar esse problema procura-se reescrever a Eq.(4.49) para se trabalhar com uma função \hat{Q} , que corresponde à função Q na forma dimensional. Para isso define-se

$$Q_e \Delta_e \phi = \hat{Q}_e \quad (4.53)$$

O fluxo numérico para esse esquema, considerando um caso linear, fica (Roe, 1984)

$$f_e = \frac{1}{2} \left\{ a (\phi_E + \phi_P) - \left[\beta \lambda a^2 \hat{Q}_e + |a| (\Delta_e \phi - \hat{Q}_e) \right] \right\} \quad (4.54)$$

e para o caso não-linear

$$f_e = \frac{1}{2} \left\{ (f_E + f_P) - \left[\beta \lambda a_e^2 \hat{Q}_e + \psi(a_e) (\Delta_e \phi - \hat{Q}_e) \right] \right\} \quad (4.55)$$

Para tornar esse esquema apropriado para trabalhar com métodos implícitos ou problemas de regime permanente Yee(1987b) introduziu o coeficiente β , que será “0” nesses casos e “1” para métodos explícitos e problemas transientes. Para satisfazer a condição de entropia (Eq. 2.11) quando a velocidade característica for nula, se substitui o módulo da velocidade característica na Eq.(4.54) pela função dada pela Eq.(4.13). Algumas das funções limitadoras Q mais comuns, já utilizando a definição da Eq.(4.53), para esse esquema são

$$\hat{Q}_e = \minmod(\Delta_w \phi, \Delta_e \phi, \Delta_{ee} \phi) \quad (4.56)$$

$$\hat{Q}_e = \minmod(\Delta_e \phi, \Delta_w \phi) + \minmod(\Delta_e \phi, \Delta_{ee} \phi) - \Delta_e \phi \quad (4.57)$$

$$\hat{Q}_e = \minmod \left[2\Delta_w \phi, 2\Delta_e \phi, 2\Delta_{ee} \phi, \frac{1}{2}(\Delta_w \phi + \Delta_{ee} \phi) \right] \quad (4.58)$$

Fazendo $\beta = 1$ a primeira função (Eq. 4.55) equívale ao esquema original de Davis(1984) enquanto que o esquema de Roe(1984) engloba as três funções (Eqs. 4.57, 4.56 e 4.58). Fazendo $\beta = 0$ para problemas transientes explícitos, e $\beta = 1$ para problemas de regime permanente ou implícitos com qualquer uma das funções (Eqs. 4.57, 4.56 e 4.58), resulta no esquema de Yee(1987a,b).

4.6 Extensão para Sistemas de Leis de Conservação

De nada adiantaria o desenvolvimento de sofisticadas ferramentas numéricas, como os esquemas de alta resolução, usando problemas simplificados se esses não pudessem ser aplicados em problemas mais complexos. Os problemas gerais da Mecânica dos Fluidos são governados pelo sistema de equações não-lineares formado pelas equações de Navier-Stokes, cujas equações de Euler são um caso particular.

Considere as equações de Euler na forma diferencial para um problema quase-unidimensional onde a seção varia de acordo com uma função $A(x)$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial(\rho A)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u)A}{\partial x} &= 0 \\
\frac{\partial(\rho u A)}{\partial t} + \frac{\partial[(\rho u u + P)A]}{\partial x} &= P \frac{\partial A}{\partial x} \\
\frac{\partial(EA)}{\partial t} + \frac{\partial[(E+P)uA]}{\partial x} &= 0
\end{aligned} \tag{4.59}$$

Para um problema de seção constante se recupera a forma original das equações de Euler.

A abordagem mais imediata de solução desse sistema (Eq. 4.59) é a aplicação do esquema numérico em cada lei de conservação de forma sequencial. Dessa forma as não-linearidades de cada equação são tratadas pelo esquema numérico enquanto que as não-linearidades do sistema (acoplamento entre as equações) são resolvidas pela iteração entre as equações. Esse tipo de abordagem trabalha diretamente com as leis na sua forma original permitindo uma forte correspondência física com o modelo matemático. Essa abordagem é bastante comum nos métodos de volumes finitos (Jameson, 1981; Maliska, 1995, Cap.7). Observa-se que ao resolver cada equação separadamente está-se “congelando” as demais incógnitas o que significa uma linearização local do problema.

Outra abordagem de solução do sistema (Eq. 4.59) é a solução simultânea onde se procura resolver o problema de Riemann em cada interface dos volumes. Godunov (1959) foi o pioneiro nesses métodos utilizando um *solver* exato para o problema de Riemann. Os esquemas com essa características são denominados de **esquemas do tipo Godunov**. Além da solução do problema de Riemann nas interfaces, esses esquemas envolvem outras duas etapas de natureza puramente numérica: determinação de novos estados médios e a distribuição da variável no interior dos volumes. Caso se escolha trabalhar com uma distribuição homogênea essas etapas se confundirão, porém, num caso genérico isso não acontecerá. Essas etapas determinam a ordem de precisão do esquema numérico.

O esquema original de Godunov (1959) apesar de resolver o problema de Riemann exatamente, o que exige bastante esforço computacional, possui apenas primeira ordem de precisão. Para contornar esse problema foram desenvolvidos *solvers* aproximados de Riemann (Roe, 1981a; Harten e Lax, 1981) que procuram adequar desempenho computacional e resolução numérica.

No presente trabalho utilizar-se-á a aproximação de Roe para o *solver* de Riemann que pode ser visto como um caso particular do método das características locais (Yee, 1987). A idéia geral por trás desse método é a substituição do sistema não-linear original por um sistema linear de coeficientes constantes aproximado para determinar a solução. Para analisá-lo considere as equações de Euler (Eq. 4.59) escritas vetorialmente em termos de U e $F(U)$ (Eq. 3.39) na forma quase-linear, dada por

$$\frac{\partial U}{\partial t} + A(U) \frac{\partial U}{\partial x} = S \quad A(U) = \frac{\partial F(U)}{\partial U} \tag{4.60}$$

onde $A(U)$ é uma matriz jacobiana $m \times m$, onde m é o número de componentes do vetor U . O vetor S será nulo, com exceção da componente relativa à quantidade de movimento linear em problemas quase-unidimensionais.

Supondo que o problema seja estritamente hiperbólico (autovalores reais e distintos) pode-se calcular as matrizes $[R]$ e $[L]$ e $[\Lambda]$. Na primeira, as colunas são formadas pelos autovetores à direita, r^k , na segunda, as linhas são formadas pelos autovetores à esquerda, l^k , sendo que $[L] = [R]^{-1}$. A última é uma matriz diagonal, cujos elementos são os autovalores, associados à matriz jacobiana $A(U)$, que representam as velocidades de propagação das variáveis características (Eq. 4.63).

Para as equações de Euler os autovalores são: $u - c$, u , $u + c$, onde c é a velocidade do som local). As expressões dessas matrizes podem ser facilmente encontradas na literatura (Hirsch, 1988, Cap.16; Yee, 1987). O sistema de equações (Eq. 4.60) pode então ser reescrito da seguinte forma,

$$\frac{\partial U}{\partial t} + [R][\Lambda][R]^{-1} \frac{\partial U}{\partial x} = S \quad (4.61)$$

Pré-multiplicando a Eq.(4.61) por $[R]^{-1}$ obtém-se

$$[R]^{-1} \frac{\partial U}{\partial t} + [\Lambda][R]^{-1} \frac{\partial U}{\partial x} = [R]^{-1} S \quad (4.62)$$

Até o momento nenhuma hipótese simplificativa foi feita e todas as não-linearidades estão consideradas na Eq.(4.62). O método das características locais assume que $A(U)$ é localmente constante, conseqüentemente $[R]$, $[R]^{-1}$ e $[\Lambda]$. Assim pode-se passar $[R]^{-1}$ para dentro das derivadas. Definindo-se a variável característica como sendo

$$W = [R]^{-1} U \quad w^k = l^k U \quad (4.63)$$

onde k indica a k -ésima componente do vetor das variáveis características. Pode-se dessa forma reescrever a Eq.(4.62) como um conjunto de leis de conservação hiperbólicas escalares desacopladas

$$\frac{\partial w^k}{\partial t} + \lambda^k \frac{\partial w^k}{\partial x} = s^k \quad (4.64)$$

onde s^k é a componente do vetor $[R]^{-1}S$. Dessa forma pode-se aplicar o esquema numérico em cada equação característica (Eq. 4.64) separadamente. Essa aproximação é aceitável para pequenos incrementos no tempo e espaço. A forma final escrita em termos das variáveis originais (Eq. 3.39) se assemelha ao caso escalar mas apresenta um acoplamento com as variáveis características através dos autovetores R . O fluxo numérico assume a seguinte forma

$$f_e = \frac{1}{2} \left[f_E + f_P + \sum_1^m R_e^k \Phi_e^k \right] \quad (4.65)$$

A matriz R_e é avaliada em termos de alguma média simétrica de U_L e U_R , por exemplo uma média aritmética, $R_e = R \left(\frac{U_L + U_R}{2} \right)$, onde os sub-índices "L" e "R" indicam os estados

imediatamente à esquerda e à direita da interface respectivamente. Os valores de U_L e U_R só serão iguais a U_P e U_E , respectivamente, se o esquema for de primeira ordem. Nesse caso assume-se que a distribuição da variável é constante no volume de controle. Para esquemas de primeira e segunda ordem, assume-se uma perfil linear e parabólico, respectivamente (Van Leer, 1979; Collela e Woodward, 1984).

As componentes Φ_e^k têm a mesma estrutura da equação escalar substituindo-se a_e por a_e^k , $\Delta_e U$ por α_e^k , sendo essa última a componente do salto na direção r^k , dada por

$$\alpha = [R]^{-1} \Delta_e U \quad \alpha^k = l^k \Delta_e U \quad (4.66)$$

Para a aproximação de Roe (1981a) é proposto o seguinte estado médio na interface,

$$\rho_e = \frac{\rho_L + D \rho_R}{1 + D} \quad u_e = \frac{u_L + D u_R}{1 + D} \quad H_e = \frac{H_L + D H_R}{1 + D} \quad (4.67)$$

onde

$$D = \sqrt{\frac{\rho A_R}{\rho A_L}} \quad (4.68)$$

e H é a entalpia total. Esse estado médio de Roe (1981a) tem uma série de destaques: garante que o esquema é conservativo; se os estados à direita e à esquerda são conectados por um choque ou descontinuidade o *solver* aproximado de Roe resolve o problema de Riemann exatamente; os autovalores (baseados no estado médio (Eq. 4.67)) são reais; bom comportamento em regiões suaves. Uma das suas desvantagens é que essa aproximação não satisfaz a condição de entropia quando os autovalores mudam de sinal (ponto sônico) e sua fraca capacidade de tratar a interação de mais de um choque ou descontinuidades.

Existem vários outros *solvers* aproximados para o problema de Riemann porém não é objetivo desse texto discutir sobre a teoria dos *solvers* de Riemann. Uma boa revisão sobre esse assunto pode ser encontrado em LeVeque (1990, Cap.6).

5 ESQUEMAS DE INTERPOLAÇÃO NVD

Os esquemas de alta resolução foram desenvolvidos para leis de conservação hiperbólica escalar linear ou não-linear e sistemas de equações com coeficientes constantes (Yee, 1987b).

Para escoamentos incompressíveis, com o desaparecimento do acoplamento entre o campo de pressão e densidade, feita através da equação de estado, não é possível se definir um sistema característico. Sendo assim os esquemas de alta resolução não podem ser diretamente aplicados.

Um procedimento amplamente utilizado no método de volumes finitos em escoamentos incompressíveis é a solução sequencial das equações em conjunto com esquemas de interpolação nas variáveis primitivas. O campo de pressão é obtido via equação de correção dessa variável obtida via manipulação das equações discretizadas da conservação da massa e quantidade de movimento linear. Esses procedimentos têm forte apelo físico e são conhecidos como **tratamento do acoplamento pressão-velocidade**. Alguns dos mais relevantes são descritos em Maliska (1995, Cap.7 e 8).

Os esquemas TVD, assim como os esquemas tradicionais, não podem ser diretamente aplicados como esquemas de interpolação. Isso, porém, não impede que suas idéias sejam usadas para o desenvolvimento de esquemas de interpolação de alta resolução. Essa extensão é de grande utilidade haja vista o grande número de usuários do método de volumes finitos que utilizam esquemas de interpolação e buscam aqueles que são estáveis e com introdução de pequena dissipação numérica.

Gaskell e Lau(1988) numa análise de uma equação convectiva-difusiva em regime permanente e sem termo fonte de uma propriedade escalar chegaram a critérios de limitação dos termos convectivos conhecido como CBC (*Convective Boundness Criteria*). Com esses critérios pode-se desenvolver esquemas de interpolação com características de alta resolução. Esses critérios são facilmente visualizados através de um diagrama normalizado de variáveis conhecido como diagrama NVD (*Normalized Variable Diagram*) que caracteriza os esquemas de interpolação.

Nos primeiros trabalhos (Gaskell e Lau, 1988; Leonard, 1988; Darwish, 1993), a implementação dos esquemas NVD era feita por uma complicada lógica computacional. Lien e Leschziner (1994a) implementaram um esquema NVD utilizando limitadores de forma semelhante aos limitadores de fluxo do esquema TVD. A seguir o esquema NVD será apresentado e uma generalização do trabalho de Lien e Leschziner (1994a) no uso de limitadores será conduzida num paralelo com os esquemas TVD limitador de fluxo.

5.1 A Normalização das Variáveis

Analisando um problema convectivo numa malha cartesiana regularmente espaçada onde a propriedade ϕ é transportada por um fluxo através de uma face do volume de controle, de velocidade normal u_n , se pode escrever esquemas de interpolação *upwind* de até terceira ordem envolvendo dois pontos a montante e um a jusante (QUICK, *upwind* de primeira e segunda ordem, diferenças centrais, WUDS, Power Law, ...). Para $u_n > 0$ na face “este” o esquema envolverá os pontos W, P e E (figura 5.1).

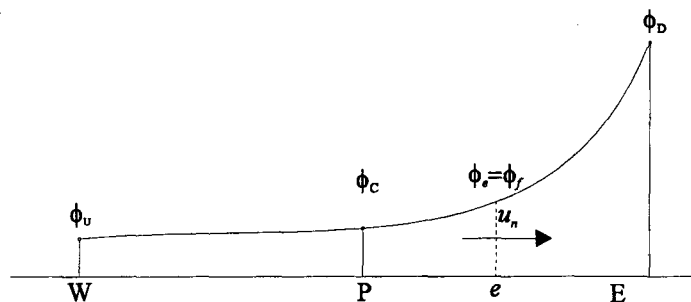


Figura 5.1 - Representação das propriedades no plano físico.

Os sub-índices da propriedade ϕ indicam a posição do ponto em relação à face que se está investigando com base no sentido da convecção através da mesma. Seguindo a mesma convenção de Gaskell e Lau (1988), tem-se

U → **UPSTREAM** (montante)

C → **CENTRAL**

D → **DOWNSTREAM** (jusante)

Usando essa notação consegue-se trabalhar sempre no sentido da convecção independente do sinal de u_n . Para simplificar a análise e melhorar a visão geral dos esquemas de interpolação que envolvem esses três pontos, Gaskell e Lau (1988) propuseram uma normalização que leva em consideração o sentido da convecção da seguinte forma

$$\tilde{\phi} = \frac{\phi - \phi_U}{\phi_D - \phi_U} \quad (5.1)$$

Aplicando a normalização (Eq. 5.1) no esquema da figura 5.1 se obtém a representação das propriedades no plano normalizado (figura 5.2). A face representada nesse plano pode ser qualquer desde que se tenha dois pontos a montante e um a jusante.

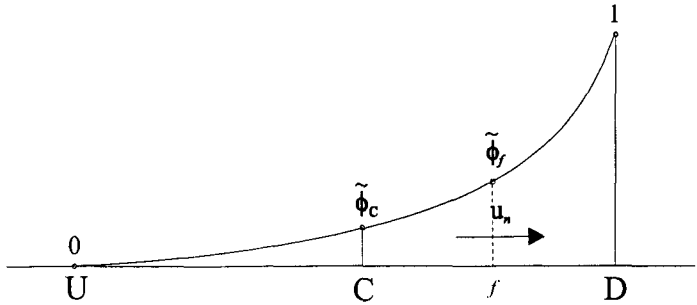


Figura 5.2 - Representação das propriedades no plano normalizado.

Nesse plano as variáveis normalizadas nos pontos *upstream* e *downstream* são constantes, $\tilde{\phi}_u = 0$ e $\tilde{\phi}_d = 1$, tornando a variável (normalizada) na face ($\tilde{\phi}_c$) apenas função da variável no ponto central ($\tilde{\phi}_c$). Na tabela 5.1 são apresentadas as expressões de alguns esquemas de interpolação nos planos físico e normalizado. Pode-se perceber que os diversos esquemas de interpolação são descritos por equações de retas.

Tabela 5.1- Representação dos esquemas de interpolação no plano físico e normalizado.

Esquema de Interpolação	Plano Físico	Plano Normalizado
<i>Upwind</i> 1ª ordem	$\phi_f = \phi_c$	$\tilde{\phi}_f = \tilde{\phi}_c$
<i>Upwind</i> 2ª ordem	$\phi_f = \frac{3}{2}\phi_c - \frac{1}{2}\phi_u$	$\tilde{\phi}_f = \frac{3}{2}\tilde{\phi}_c$
Diferença Central (2ª ordem)	$\phi_f = \frac{1}{2}(\phi_d + \phi_c)$	$\tilde{\phi}_f = 0,75 + 0,5(\tilde{\phi}_c - 0,5)$
QUICK	$\phi_f = \frac{1}{2}(\phi_d + \phi_c) - \frac{1}{8}(\phi_d - 2\phi_c + \phi_u)$	$\tilde{\phi}_f = 0,75 + 0,75(\tilde{\phi}_c - 0,5)$
<i>Cubic Upwind Interpolation</i> (CUI)	$\phi_f = \frac{1}{6}(2\phi_d + 5\phi_c - \phi_u)$	$\tilde{\phi}_f = 0,75 + \frac{5}{6}(\tilde{\phi}_c - 0,5)$

5.2 Diagrama NVD

Os esquemas podem ser comparados entre si de uma forma mais compacta através de um diagrama $\tilde{\phi}_f = F(\tilde{\phi}_c)$ conhecido como **NVD** (*Normalized Variable Diagram*). Esse diagrama é um plano de trabalho que possibilita a visualização de diversos esquemas de interpolação de forma simplificada reduzindo o número de incógnitas. Após a análise, o esquema para ser implementado deve ser “traduzido” para o plano físico onde as expressões se tornam mais complexas.

Na figura 5.3 a região apresentada em hachuras corresponde à região **CBC** (*Convective Boundness Criterion*) obtida por Gaskell e Lau (1988). Segundo esse critério todo esquema para ter garantida a limitação (*bounding*) da propriedade interpolada deve:

- Passar pelos pontos (0,0) e (1,1).
- Ser contínua na região CBC.

Fora da região CBC temos duas situações possíveis. Na primeira, para $\tilde{\phi}_c < 0$, pela Eq.(5.1), indica que a solução está passando por um extremo (máximo ou mínimo) local, onde ocorre a inversão do sinal do gradiente, e que o gradiente maior está na face considerada. Na segunda, para $\tilde{\phi}_c > 1$, também ocorre um extremo local, porém, o maior gradiente está na face a montante da que está sendo considerada. Em ambos os casos, quando $|\tilde{\phi}_c| \rightarrow \infty$, se tem apenas a indicação de que o gradiente a montante e o da face considerada possuem valores muito próximos. Para impedir que oscilações ocorram nessas situações deve-se usar uma aproximação *upwind*.

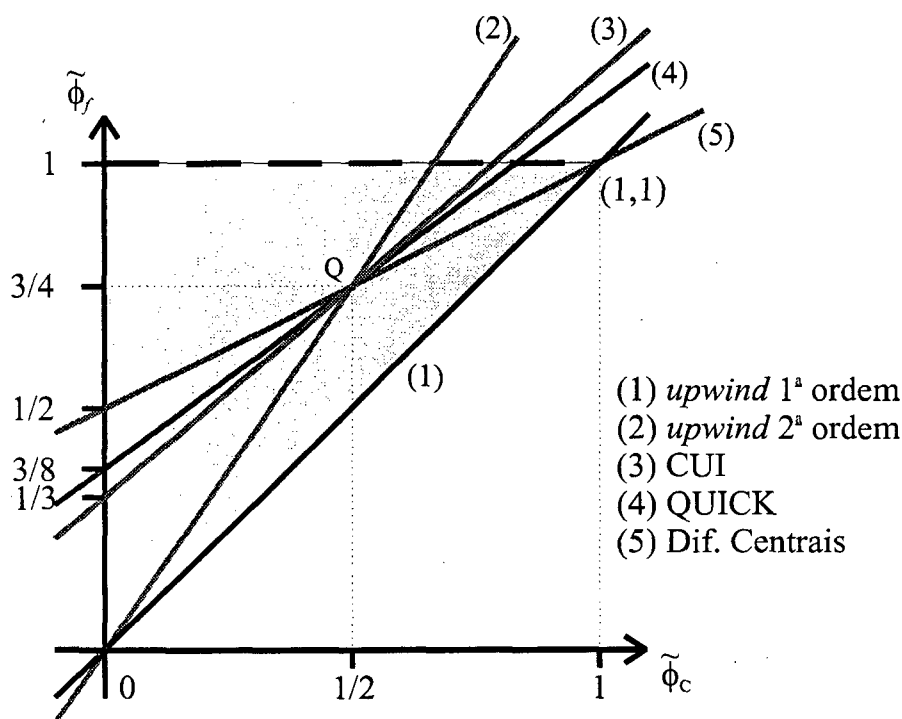


Figura 5.3 - Região CBC no diagrama NVD.

Analisando o diagrama NVD (figura 5.3) percebe-se que o esquema *upwind* é o único esquema linear que atende à essas duas condições simultaneamente. Esse esquema porém, apresenta elevados níveis de difusão numérica. Os demais esquemas atendem apenas parte dessas condições. Quando fora da região CBC o esquema avalia a propriedade na face fora dos limites de estabilidade. Outra importante observação a ser feita é a passagem de todos os esquemas de segunda e terceira ordem no ponto “Q”. Ainda outra observação, agora não tão direta, é que os esquemas de terceira ordem possuem inclinação de 0,75 nesse ponto. O fato de ter a limitação garantida não assegura que se tenha obtido um esquema de alta resolução. Para assegurar isso são feitas mais duas restrições (Gaskell e Lau, 1988):

- Passar pelo ponto “Q” (0,5;0,75) para garantir pelo menos segunda ordem.
- Ter inclinação 0,75 no ponto “Q” para garantir terceira ordem.

Alguns esquemas foram desenvolvidos no diagrama NVD (SMART, STOIC, EULER) (Darwish, 1992) fazendo uma combinação de diferentes funções $F(\tilde{\phi}_c)$ para determinadas faixas de valores de $\tilde{\phi}_c$ para atender os critérios CBC. Sua implementação computacional exige uma lógica. Pelo número de vezes com que essa lógica é avaliada, ela se torna um dos pontos críticos de códigos computacionais.

A implementação via limitador (Van Leer, 1979) confere ao código maior eficiência, simplicidade e flexibilidade. Lien e Leschziner (1994a) utilizaram esse procedimento para introduzir o limitador UMIST fazendo um paralelo com os esquemas TVD (Sweby, 1984). Esse procedimento é análogo ao utilizado por Sweby com a diferença que o primeiro aplicou o limitador diretamente na propriedade, enquanto que o último no fluxo antidifusivo. Não fica claro porque eles aplicam os mesmos limites da região de TVD de Sweby ao limitador da função de interpolação uma vez que os critérios TVD (Eq. 4.6) não foram desenvolvidos para funções de interpolação.

5.3 Região de Segunda Ordem para Limitadores NVD

A partir da investigação do trabalho de Lien e Leschziner (1994a) se originou a idéia de obter limitadores a partir de esquemas de interpolação apresentados no diagrama NVD. Os esquemas são desenvolvidos como um esquema *upwind* acrescido de uma correção antidifusiva como proposto por Sweby (1984), porém aplicado diretamente na propriedade para que seja usado como um esquema de interpolação.

Para se determinar um limitador é preciso que se defina uma região no plano $\phi \times r$ na qual os critérios CBC sejam atendidos. Partindo-se de um esquema básico (Sweby, 1984) representando a propriedade na face como sendo um esquema *upwind* acrescido de uma correção antidifusiva, tem-se

$$\phi_f = \phi_c + \frac{\phi(r_f)}{2}(\phi_u - \phi_c) \quad (5.2)$$

e em termos das variáveis normalizadas,

$$\tilde{\phi}_f = \tilde{\phi}_c + \frac{\phi(r_f)}{2}(1 - \tilde{\phi}_c) \quad (5.3)$$

sendo o limitador ϕ uma função da razão de gradientes consecutivos da propriedade (Eq. 4.34), que para uma malha cartesiana igualmente espaçada pode ser simplificada para uma razão das diferenças, dada por

$$r_f = \frac{\phi_c - \phi_u}{\phi_D - \phi_c}$$

(5.4)

É interessante, como ficará claro no próximo item, que se defina a Eq.(5.4) em termos das variáveis normalizadas e vice-versa,

$$r_f = \frac{\tilde{\phi}_c}{1 - \tilde{\phi}_c}$$

(5.5)

$$\tilde{\phi}_c = \frac{r_f}{r_f + 1}$$

(5.6)

Da região CBC (figura 5.3) e pelas relações entre a razão de gradientes e a variável normalizada (figura 5.4) percebe-se que para $\tilde{\phi}_c \leq 0 \Rightarrow r \leq 0$ e a solução passa por um patamar ou extremo local e o esquema recai num esquema *upwind* ($\tilde{\phi}_f = \tilde{\phi}_c$). Para $\tilde{\phi}_c \rightarrow 1^-$ a solução passa por grande variação a montante indicando que uma interpolação *upwind* não produziria perfis monótonos. Nesse caso o esquema de ponto a jusante ($\varphi = 2$) atende a essa condição. Quando $0 < \tilde{\phi}_c < 1$, pela região CBC (figura 5.3) permite qualquer escolha entre o esquema *upwind* ($\tilde{\phi}_f = \tilde{\phi}_c$) e o de ponto à jusante ($\tilde{\phi}_c \rightarrow 1^-$). Para $\tilde{\phi}_c = 1$, a Eq.(5.5) não é definida, porém, seu valor na vizinhança é conhecido.


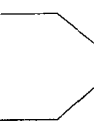


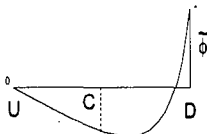
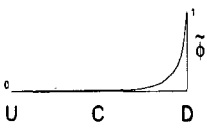
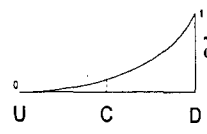
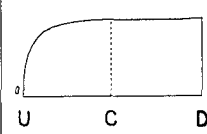
padrão de variação da variável física ϕ				
padrão de variação da variável normalizada $\tilde{\phi}$				
variável normalizada no ponto C $\tilde{\phi}_c$	$\tilde{\phi}_c < 0$	$\tilde{\phi}_c = 0$	$\tilde{\phi}_c > 0$	$\tilde{\phi}_c \rightarrow 1$
razão de gradientes r	$r < 0$	$r = 0$	$r > 0$	$r \rightarrow \infty$

Figura 5.4 - Relações entre variável normalizada e razão de gradientes ($u_n > 0$).

De acordo com a argumentação feita anteriormente pode-se definir uma região geral NVD para o limitador da variável cujos limites são apresentados na figura 5.5.

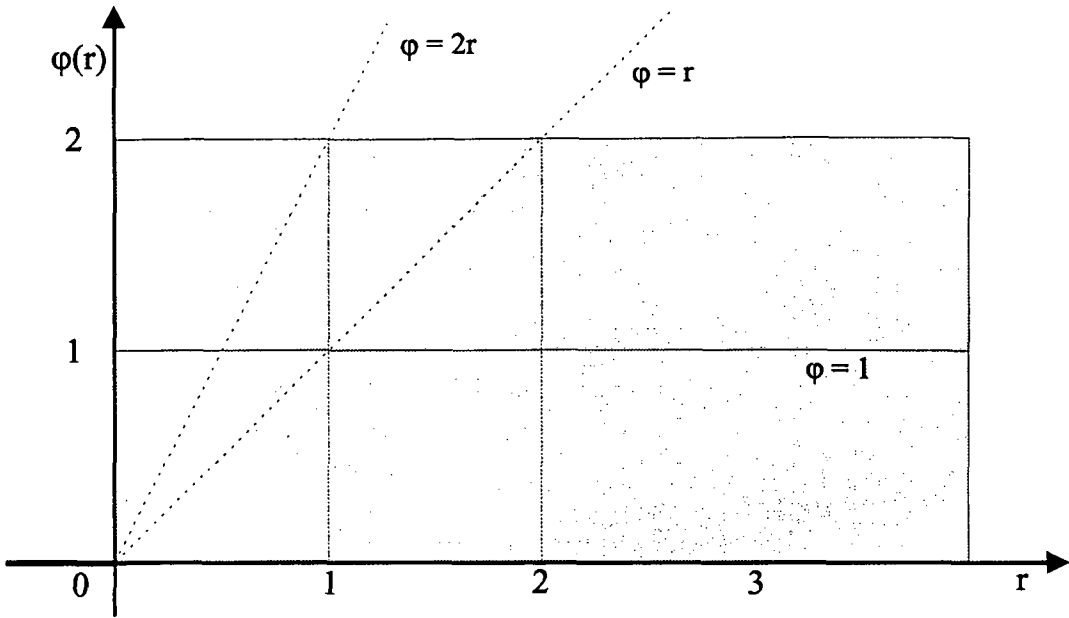


Figura 5.5 - Região geral CBC no plano $\phi \times r$.

Comparando-se a figura 5.5 com a figura 4.1 percebe-se que são idênticas a menos de uma região, $2 \leq \phi < 2r$. No esquema TVD essa região é rejeitada para atender os critérios TVD (Eq. 4.6), o que não ocorre na região CBC (figura 5.3).

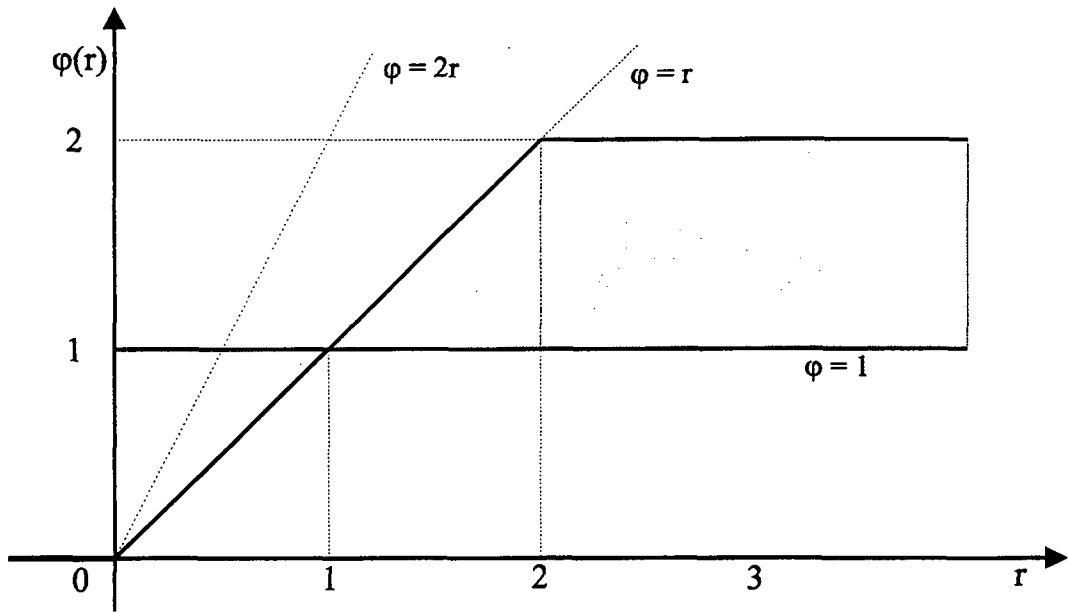


Figura 5.6 - Região CBC de segunda ordem no plano $\phi \times r$.

Para se determinar a região relativa ao esquemas de interpolação de segunda ordem usa-se o mesmo argumento de Sweby (1984): os esquemas de interpolação envolvendo três pontos (dois a jusante e um a montante) podem ser descritos como uma média convexa entre o esquema de Lax-Wendroff e Warming e Beam (Eq. 4.42). Para esquemas de interpolação esses esquemas são os de diferença central ($\phi = 1$) e *upwind* de segunda ordem. O ponto (1,1), comum aos dois

esquemas de interpolação na figura 5.6, corresponde ao ponto $Q(0,5; 0,75)$ do diagrama NVD (figura 5.3). Isso significa que em regiões suaves o esquema se torna de diferença central (Eq. 4.41).

Com a região CBC de segunda ordem determinada pode-se então construir esquemas de interpolação monotinizados na forma da Eq.(5.2) e que atendam aos critérios CBC (figura 5.3). Como essa região contém a região TVD de segunda ordem (figura 4.2), todos os limitadores TVD podem ser usados como limitadores em esquemas de interpolação. Esses esquemas podem ser facilmente implementados em códigos já existentes por meio de correção no termo fonte deixando para os coeficientes apenas a parcela *upwind* da Eq.(5.2). Essa correção é conhecida como *deferred correction* (Lien e Leschziner, 1994a, b). Uma vantagem em se proceder dessa forma é que os coeficientes serão positivos, e portanto a matriz resultante será diagonalmente dominante e simples de ser obtida. Os códigos computacionais existentes podem ser facilmente modificados para reproduzirem o esquema *upwind*. Outra vantagem é que trabalhando com a função limitadora pode-se facilmente mudar de esquema de interpolação.

5.4 Esquemas de Interpolação Limitados

Os esquemas NVD inicialmente eram implementados através de uma complicada e cara lógica computacional. Isso torna o código pouco flexível e difícil de se modificar. O procedimento para determinação do limitador de cada esquema consiste em escrever o esquema na forma normalizada e representá-lo como uma curva no diagrama NVD (figura 5.3). As regiões que ficarem fora da região CBC serão modificadas. Em seguida, em cada trecho iguala-se a Eq.(5.3) à expressão de $\tilde{\phi}_f$, e substitui-se $\tilde{\phi}_c$ pela Eq.(5.6). Ao final isola-se o limitador ϕ obtendo-se sua expressão em termos de r . A seguir serão obtidos os limitadores de diversos esquemas (Darwish, 1993; Lien e Leschziner, 1994a).

5.4.1 QUICK-NVD

Pela equação do QUICK (Leonard, 1979a) no plano normalizado (tabela 5.1), ilustrada no diagrama NVD (figura 5.3), pode-se visualizar onde o esquema deve ser modificado. Para o esquema de interpolação QUICK monotinizado ou QUICK-NVD, a função $\tilde{\phi}_f$ é dada por

$$\begin{cases} \tilde{\phi}_f = 0,75 + 0,75(\tilde{\phi}_c - 0,5) & 0 < \tilde{\phi}_c < \frac{5}{6} \\ \tilde{\phi}_f = 1 & \frac{5}{6} \leq \tilde{\phi}_c < 1 \\ \tilde{\phi}_f = \tilde{\phi}_c & \tilde{\phi}_c \leq 0, \tilde{\phi}_c > 1 \end{cases} \quad (5.7)$$

representada na figura 5.7.

$$\varphi(r) = \max(0; \min(0,75 + 0,25r; 2)) \quad (5.9)$$

O limitador (Eq. 5.9) difere do apresentado por Lien e Leschziner (1994a) devido à diferença entre a região TVD (figura 4.2) e a região CBC de segunda ordem (figura 5.8).

5.4.2 CUI-NVD

Da equação normalizada (tabela 5.1) e do diagrama NVD, para que o esquema seja monotonicizado a função $\tilde{\phi}_f$ deve atender a Eq.(5.10), dada por

$$\begin{cases} \tilde{\phi}_f = 0,75 + \frac{5}{6}(\tilde{\phi}_c - 0,5) & 0 < \tilde{\phi}_c < 0,8 \\ \tilde{\phi}_f = 1 & 0,8 \leq \tilde{\phi}_c < 1 \\ \tilde{\phi}_f = \tilde{\phi}_c & \tilde{\phi}_c \leq 0, \tilde{\phi}_c > 1 \end{cases} \quad (5.10)$$

representada está na figura 5.9.

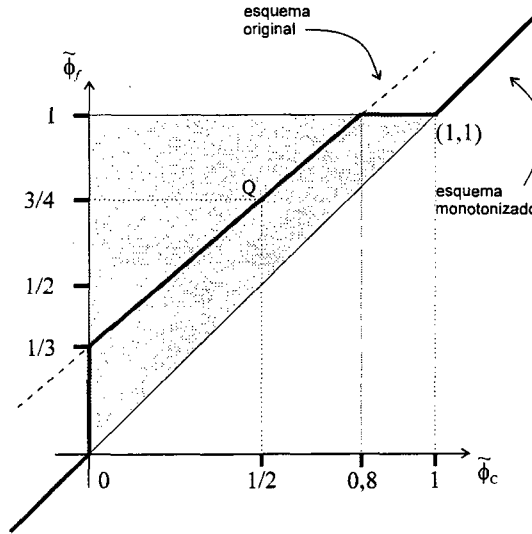


Figura 5.9 - CUI monotonicizado, diagrama NVD.

Procedendo da mesma forma que o item anterior define-se o limitador para o esquema de interpolação CUI-NVD correspondente à Eq.(5.10),

$$\begin{cases} \varphi(r) = \frac{2}{3} + \frac{1}{3}r & 0 < r < 4 \\ \varphi(r) = 2 & r \geq 4 \\ \varphi(r) = 0 & r \leq 0 \end{cases} \quad (5.11)$$

representada na figura 5.10.

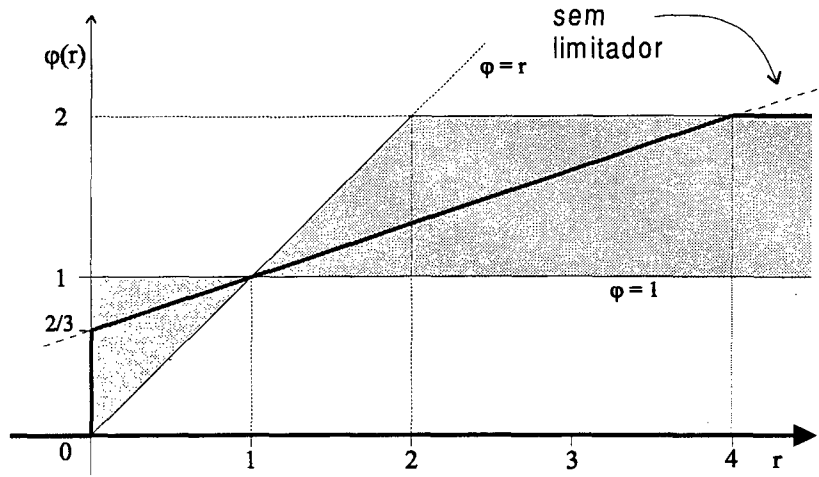


Figura 5.10 - Limitador CUI.

A expressão geral para Eq.(5.11) é dada por,

$$\varphi(r) = \max\left(0; \min\left(\frac{2}{3} + \frac{1}{3}r; 2\right)\right) \quad (5.12)$$

5.4.3 SMART

Esse esquema foi proposto por Gaskell e Lau (1988) é diferente do esquema QUICK monotonizado (figura 5.7), no trecho $0 < \tilde{\phi}_c < 1/6$, fazendo que a transição para o esquema de interpolação *upwind* seja mais suave. A função $\tilde{\phi}_f$ é dada por (Darwish, 1993)

$$\left\{ \begin{array}{ll} \tilde{\phi}_f = 3\tilde{\phi}_c & 0 < \tilde{\phi}_c < \frac{1}{6} \\ \tilde{\phi}_f = 0,75 + 0,75(\tilde{\phi}_c - 0,5) & \frac{1}{6} \leq \tilde{\phi}_c < \frac{5}{6} \\ \tilde{\phi}_f = 1 & \frac{5}{6} \leq \tilde{\phi}_c < 1 \\ \tilde{\phi}_f = \tilde{\phi}_c & \tilde{\phi}_c \leq 0, \tilde{\phi}_c > 1 \end{array} \right. \quad (5.13)$$

representada na figura 5.11.

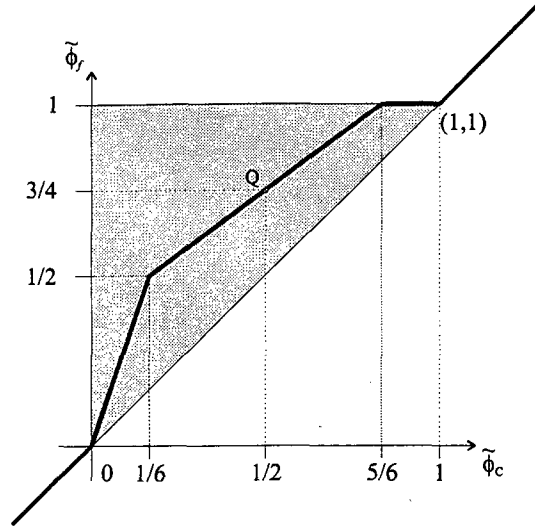


Figura 5.11 - Diagrama NVD do esquema SMART.

Procedendo da mesma forma que o item anterior, defini-se o limitador para o esquema de interpolação SMART correspondente a Eq.(5.13) como sendo

$$\left\{ \begin{array}{ll} \varphi(r) = 4r & 0 < r < 0,2 \\ \varphi(r) = 0,75 + 0,25r & 0,2 < r < 5 \\ \varphi(r) = 2 & r \geq 4 \\ \varphi(r) = 0 & r \leq 0 \end{array} \right. \quad (5.14)$$

representada na figura 5.12.

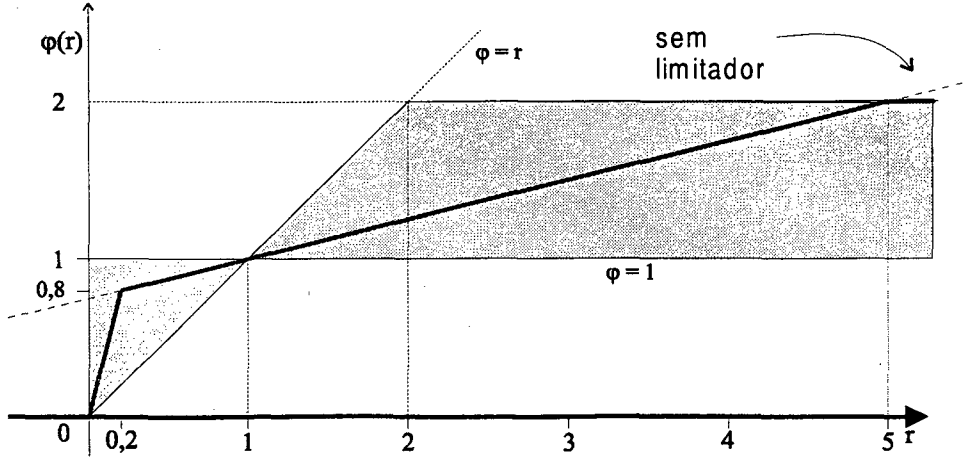


Figura 5.12 - Limitador SMART.

A expressão geral para Eq.(5.14) é dada por,

$$\varphi(r) = \max(0; \min(4r; 0,75 + 0,25r; 2)) \quad (5.15)$$

5.4.4 MUSCL

Esse esquema foi proposto por Van Leer (1979) e sua função $\tilde{\phi}_f$ é dada por (Darwish, 1993)

$$\left\{ \begin{array}{ll} \tilde{\phi}_f = 2\tilde{\phi}_c & 0 < \tilde{\phi}_c < 0,25 \\ \tilde{\phi}_f = 0,25 + \tilde{\phi}_c & 0,25 \leq \tilde{\phi}_c < 0,75 \\ \tilde{\phi}_f = 1 & 0,75 \leq \tilde{\phi}_c < 1 \\ \tilde{\phi}_f = \tilde{\phi}_c & \tilde{\phi}_c \leq 0, \tilde{\phi}_c > 1 \end{array} \right. \quad (5.16)$$

e está representada na figura 5.13.

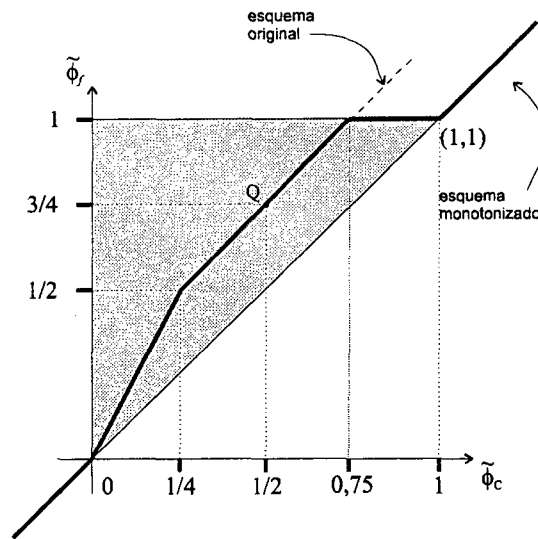


Figura 5.13 - Diagrama NVD do esquema MUSCL.

Procedendo da mesma forma que o item anterior define-se o limitador para o esquema de interpolação MUSCL correspondente à Eq.(5.16) como sendo

$$\left\{ \begin{array}{ll} \varphi(r) = 2r & 0 < r < \frac{1}{3} \\ \varphi(r) = 0,5 + 0,5r & \frac{1}{3} < r < 3 \\ \varphi(r) = 2 & r \geq 3 \\ \varphi(r) = 0 & r \leq 0 \end{array} \right. \quad (5.17)$$

representado na figura 5.14.

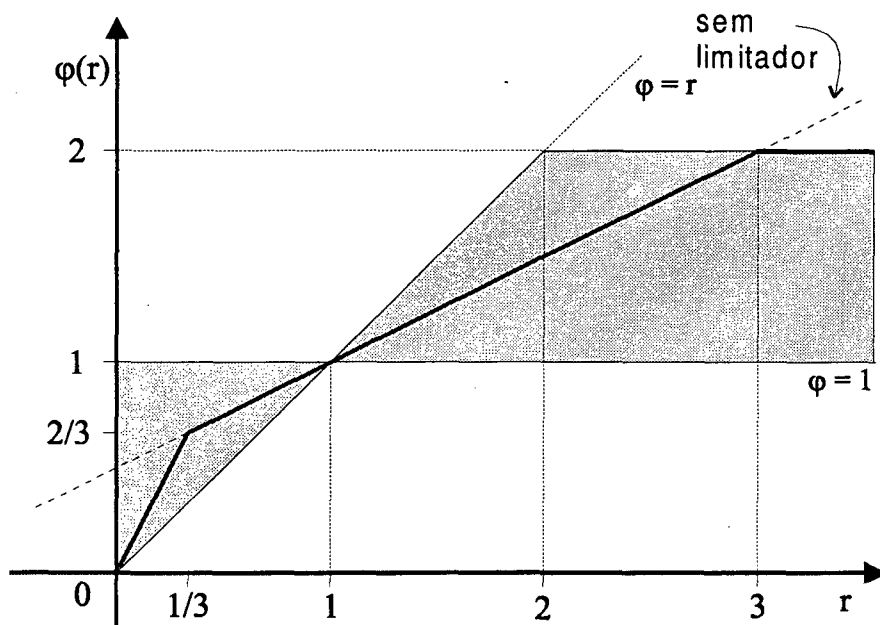


Figura 5.14 - Limitador MUSCL.

A expressão geral para Eq.(5.17) é dada por,

$$\varphi(r) = \max(0; \min(2r; 0,5 + 0,5r; 2)) \quad (5.18)$$

5.4.5 MINMOD

Esse esquema de interpolação corresponde ao limite inferior dos esquemas de alta resolução, sua função $\tilde{\phi}_f$ é dada por (Darwish, 1993)

$$\begin{cases} \tilde{\phi}_f = \frac{3}{2}\tilde{\phi}_c & 0 < \tilde{\phi}_c < 0,5 \\ \tilde{\phi}_f = 0,5 + 0,5\tilde{\phi}_c & 0,5 < \tilde{\phi}_c < 1 \\ \tilde{\phi}_f = \tilde{\phi}_c & \tilde{\phi}_c \leq 0, \tilde{\phi}_c > 1 \end{cases} \quad (5.19)$$

e está representada na figura 5.15.

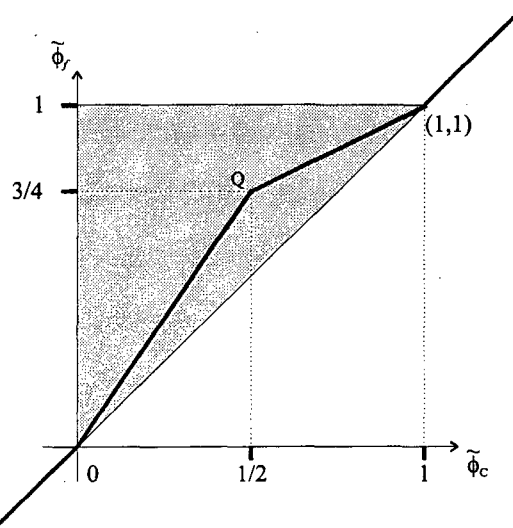


Figura 5.15 - Diagrama NVD do esquema MINMOD.

Procedendo da mesma forma que nos itens anteriores define-se o limitador para o esquema de interpolação MINMOD correspondente a Eq.(5.19), como sendo

$$\begin{cases} \varphi(r) = r & 0 < r \leq \frac{1}{3} \\ \varphi(r) = 1 & r > 1 \\ \varphi(r) = 0 & r \leq 0 \end{cases} \quad (5.20)$$

representado na figura 5.16.

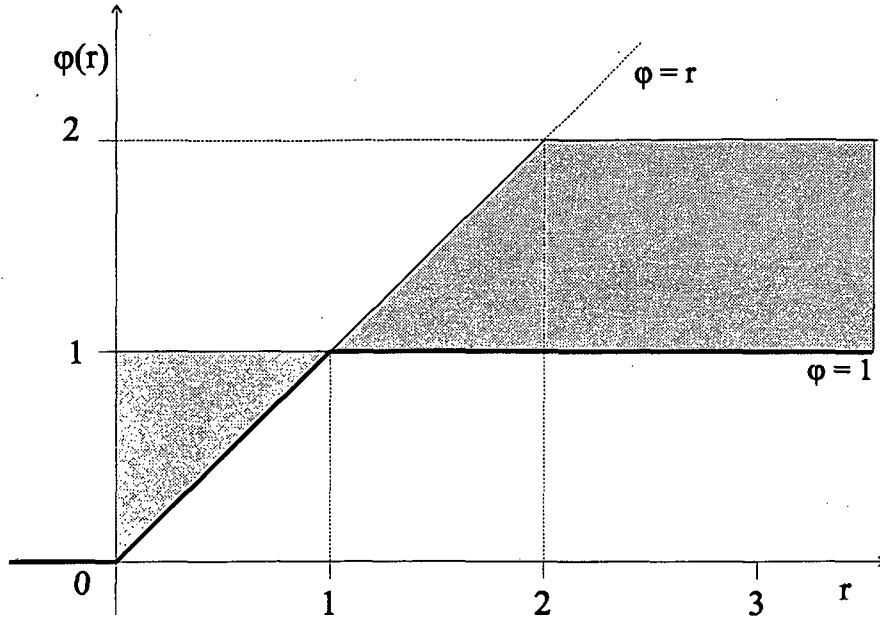


Figura 5.16 - Limitador MINMOD.

A expressão geral para Eq.(5.20) é dada por,

$$\varphi(r) = \max(0; \min(r; 1)) \quad (5.21)$$

5.4.6 CLAM

Esse limitador foi proposto por Van Leer (1977b) e sua função $\tilde{\phi}_f$ é dada por (Darwish, 1993)

$$\begin{cases} \tilde{\phi}_f = \tilde{\phi}_c (2 - \tilde{\phi}_c) & 0 < \tilde{\phi}_c \leq 1 \\ \tilde{\phi}_f = \tilde{\phi}_c & \tilde{\phi}_c \leq 0, \tilde{\phi}_c > 1 \end{cases} \quad (5.22)$$

e está representada na figura 5.17.

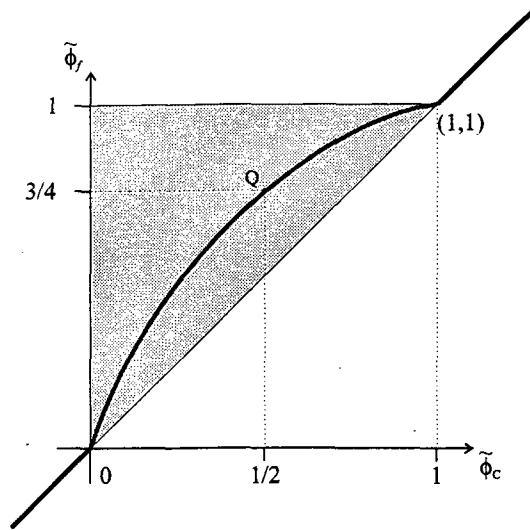


Figura 5.17 - Diagrama NVD do esquema CLAM.

Procedendo da mesma forma que nos itens anteriores define-se o limitador para o esquema de interpolação CLAM correspondente a Eq.(5.22), como sendo

$$\begin{cases} \varphi(r) = \frac{2r}{r+1} & r > 0 \\ \varphi(r) = 0 & r \leq 0 \end{cases} \quad (5.23)$$

representado na figura 5.18.

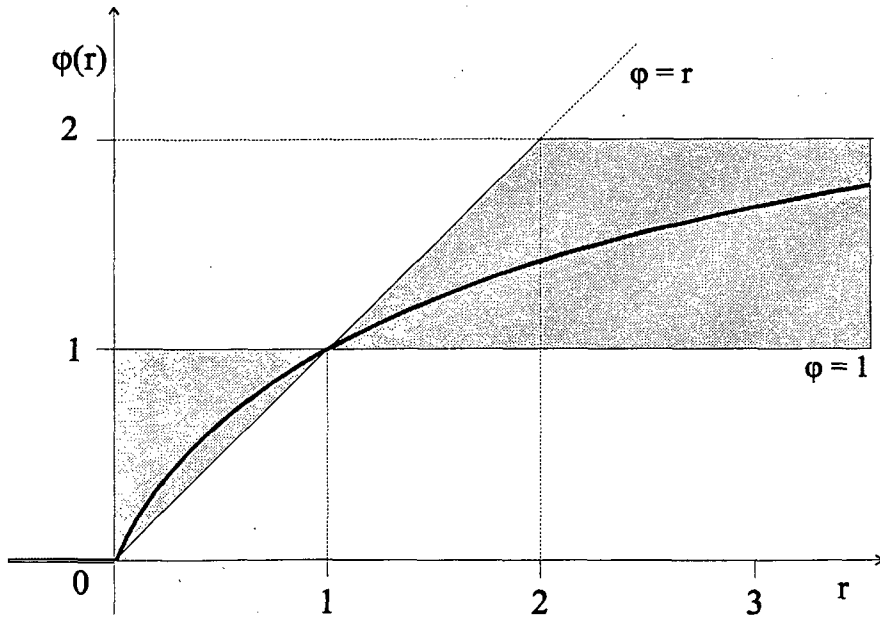


Figura 5.18 - Limitador CLAM ou de Van Leer.

A expressão geral para Eq (5.23) pode ser expressa por uma única expressão sem ter que envolver funções de máximo e mínimo, da seguinte forma

$$\varphi(r) = \frac{|r| + r}{r + 1} \quad (5.24)$$

5.4.7 OSHER

O esquema de interpolação OSHER corresponde a um esquema *upwind* de segunda ordem monotonicizado. A função $\tilde{\phi}_f$ é dada por (Darwish, 1993)

$$\begin{cases} \tilde{\phi}_f = \frac{3}{2} \tilde{\phi}_c & 0 < \tilde{\phi}_c < \frac{2}{3} \\ \tilde{\phi}_f = 1 & \frac{2}{3} < \tilde{\phi}_c < 1 \\ \tilde{\phi}_f = \tilde{\phi}_c & \tilde{\phi}_c \leq 0, \tilde{\phi}_c > 1 \end{cases} \quad (5.25)$$

e está representada na figura 5.19.

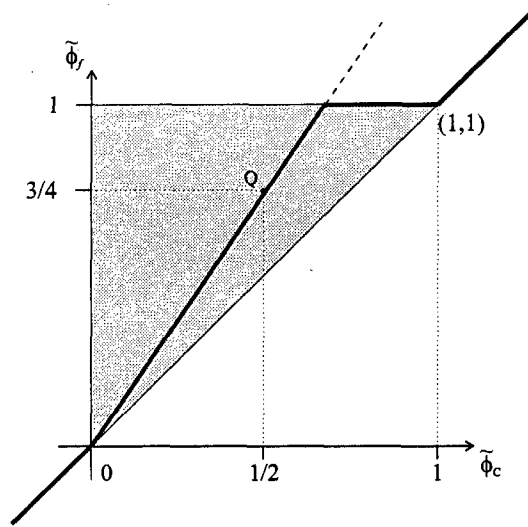


Figura 5.19 - Diagrama NVD do esquema de OSHER.

Procedendo da mesma forma que nos itens anteriores define-se o limitador para o esquema de interpolação OSHER correspondente a Eq.(5.25), como sendo

$$\begin{cases} \varphi(r) = r & 0 < r \leq 2 \\ \varphi(r) = 2 & r > 2 \\ \varphi(r) = 0 & r \leq 0 \end{cases} \quad (5.26)$$

representada na figura 5.20.

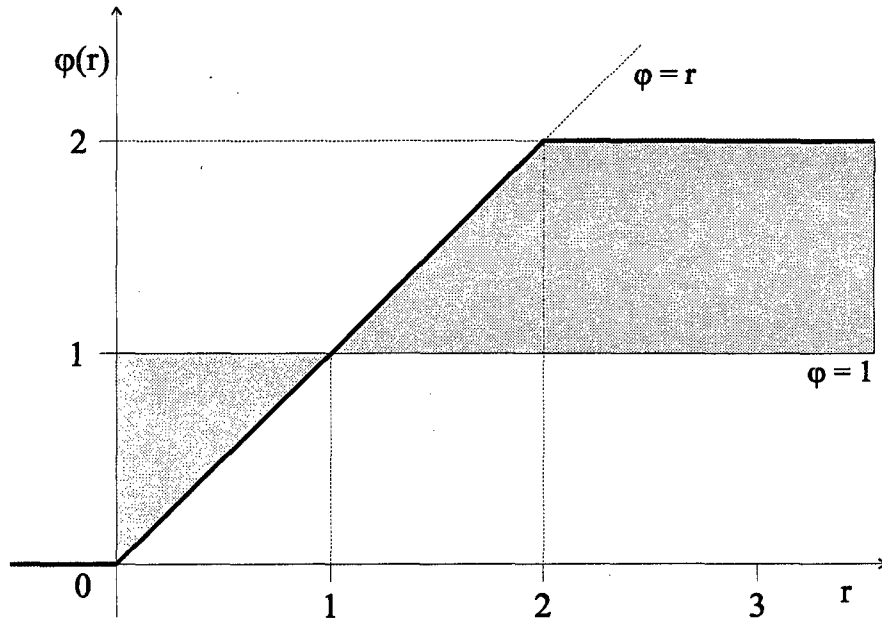


Figura 5.20 - Limitador OSHER.

Esse limitador corresponde a um caso particular do esquema de Osher-Chakravarthy (Eq. 4.46) para $\beta = 2$. A expressão geral para Eq.(5.26) é dada por,

$$\varphi(r) = \max(0; \min(r; 2)) \quad (5.27)$$

5.4.8 EULER

O esquema de interpolação EULER (Leonard, 1983) assume um perfil exponencial *upwind*. Sua função $\tilde{\phi}_f$ é dada por (Darwish, 1993)

$$\left\{ \begin{array}{ll} \tilde{\phi}_f = \frac{\sqrt{\tilde{\phi}_c(1-\tilde{\phi}_c)^3} - \tilde{\phi}_c}{(1-2\tilde{\phi}_c)} & 0 < \tilde{\phi}_c < 1 \\ \tilde{\phi}_f = 0,75 & \tilde{\phi}_c = 0,5 \\ \tilde{\phi}_f = \tilde{\phi}_c & \tilde{\phi}_c \leq 0, \tilde{\phi}_c > 1 \end{array} \right. \quad (5.28)$$

representada na figura 5.21.

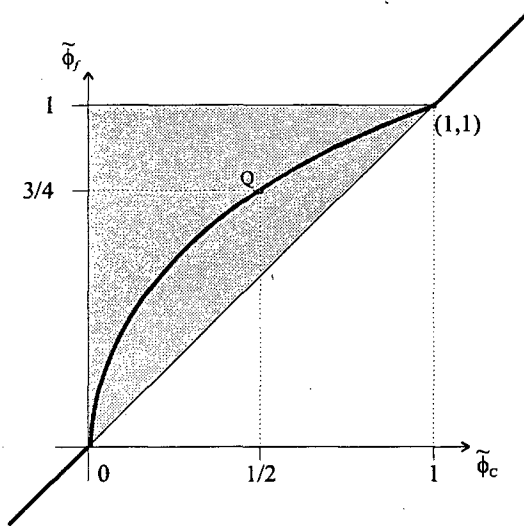


Figura 5.21 - Diagrama NVD do esquema EULER.

Procedendo da mesma forma que nos itens anteriores define-se o limitador para o esquema de interpolação OSHER correspondente a Eq.(5.28), como sendo

$$\left\{ \begin{array}{ll} \varphi(r) = \frac{2r}{\sqrt{r} + r} & r > 0 \\ \varphi(r) = 0 & r \leq 0 \end{array} \right. \quad (5.29)$$

representada na figura 5.22.

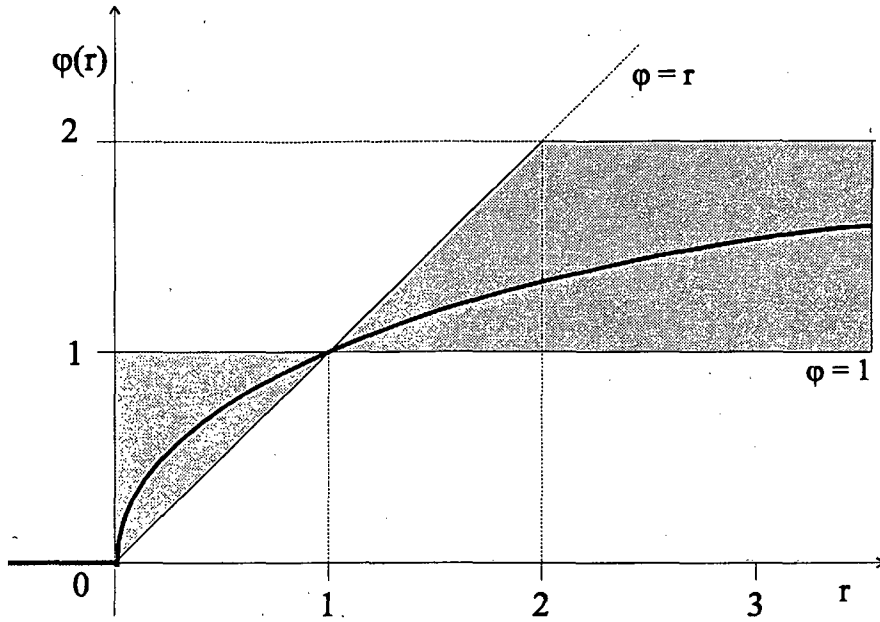


Figura 5.22 - Limitador EULER.

A expressão geral para Eq.(5.29) é dada por,

$$\varphi(r) = \frac{r + |r|}{\sqrt{|r|} + r} \quad (5.30)$$

5.4.9 STOIC

O esquema de interpolação STOIC (Darwish, 1993) foi desenvolvido após uma análise de alguns dos esquemas NVD anteriores. Sua função $\tilde{\phi}_f$ é dada por

$$\left\{ \begin{array}{ll} \tilde{\phi}_f = 3\tilde{\phi}_c & 0 < \tilde{\phi}_c \leq 0,2 \\ \tilde{\phi}_f = 0,5(1 + \tilde{\phi}_c) & 0,2 < \tilde{\phi}_c \leq 0,5 \\ \tilde{\phi}_f = 0,375 + 0,75\tilde{\phi}_c & 0,5 \leq \tilde{\phi}_c < \frac{5}{6} \\ \tilde{\phi}_f = 1 & \frac{5}{6} \leq \tilde{\phi}_c < 1 \\ \tilde{\phi}_f = \tilde{\phi}_c & \tilde{\phi}_c \leq 0, \tilde{\phi}_c > 1 \end{array} \right. \quad (5.31)$$

representada na figura 5.23.

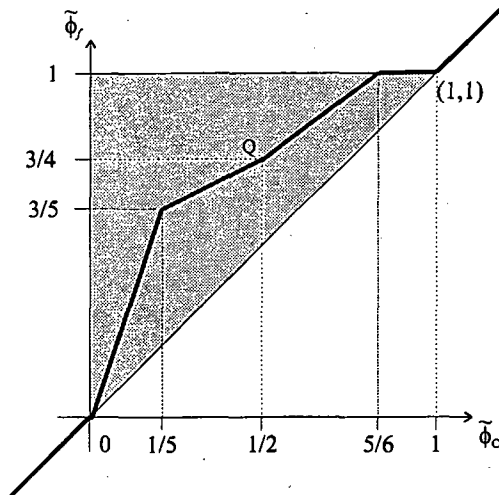


Figura 5.23 - Diagrama NVD do esquema STOIC.

Procedendo da mesma forma que nos itens anteriores define-se o limitador para o esquema de interpolação OSHER correspondente a Eq.(5.31), como sendo

$$\left\{ \begin{array}{ll} \varphi(r) = 4r & 0 < r \leq 0,25 \\ \varphi(r) = 1 & 0,25 < r \leq 1 \\ \varphi(r) = 0,75 + 0,25r & 1 < r \leq 5 \\ \varphi(r) = 2 & r > 5 \\ \varphi(r) = 0 & r \leq 0 \end{array} \right. \quad (5.32)$$

representada na figura 5.24.

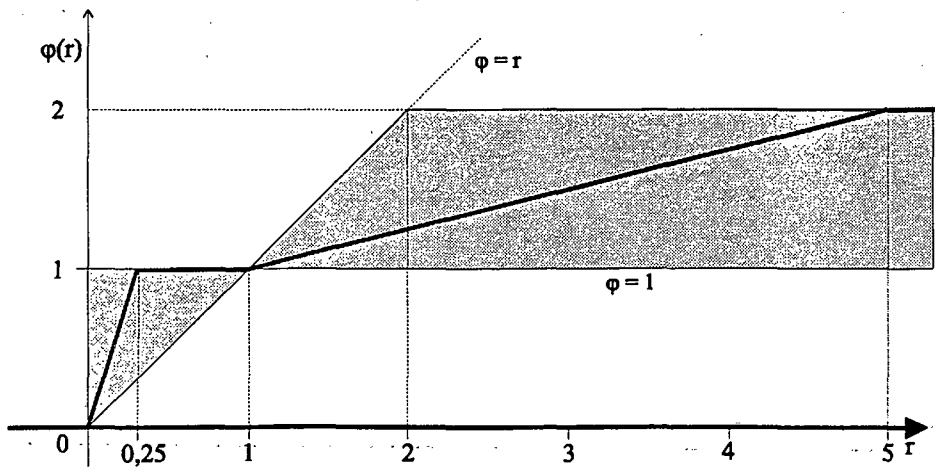


Figura 5.24 - Limitador STOIC.

A expressão geral para Eq.(5.32) é dada por,

$$\varphi(r) = \max(0; \min(4r; 1); \min(4r; 0,75 + 0,25r; 2)) \quad (5.33)$$

Esse esquema de interpolação foi testado para três problemas escalares (Darwish, 1993) onde apresentou resultados melhores que os esquemas anteriores. Apesar desse resultado favorável, o STOIC não passou no problema de convecção numa cavidade quadrada, motivo pelo qual não foi utilizado no capítulo de resultados.

5.4.10 Resumo dos Limitadores

A seguir são reunidos os vários limitadores dos esquemas de interpolação obtidos nos itens anteriores e o limitador UMIST (Lien e Leschziner, 1994a) na última linha para uma comparação geral de suas expressões. Como a região TVD de segunda ordem (figura 4.2) é uma sub-região da região CBC de segunda ordem (figura 5.6), todos os limitadores TVD podem ser considerados para um esquema de interpolação NVD, foi o que se observou com os esquemas CLAM, OSHER e MINMOD.

Tabela 5.2 - Limitadores para esquemas NVD.

QUICK-NVD	$\varphi(r) = \max(0; \min(0,75 + 0,25r; 2))$
CUI-NVD	$\varphi(r) = \max(0; \min(\frac{2}{3} + \frac{1}{3}r; 2))$
SMART	$\varphi(r) = \max(0; \min(4r; 0,75 + 0,25r; 2))$
MUSCL	$\varphi(r) = \max(0; \min(2r; 0,5 + 0,5r; 2))$
MINMOD	$\varphi(r) = \max(0; \min(1; r))$
CLAM (Van Leer)	$\varphi(r) = \frac{r + r }{1 + r}$
EULER	$\varphi(r) = \frac{r + r }{\sqrt{ r } + r}$
OSHER	$\varphi(r) = \max(0; \min(2; r))$
STOIC	$\varphi(r) = \max(0; \min(4r; 1), \min(4r; 0,75 + 0,25r; 2))$
UMIST	$\varphi(r) = \max(0; \min(2r; 0,25 + 0,75r; 0,75 + 0,25r; 2))$

6 RESULTADOS E DISCUSSÕES

Neste capítulo os diferentes esquemas numéricos de alta resolução serão testados e comparados em problemas envolvendo choques, descontinuidades de contato, e rarefações. Os esquemas de interpolação serão utilizados no problema clássico de convecção forçada em uma cavidade quadrada. Soluções analíticas ou *benchmark* serão usadas como referência para discutir a qualidade desses esquemas. Os programas utilizados para testar os diferentes esquemas numéricos em solução simultânea, foram desenvolvidos pelo autor ao longo do presente trabalho. Os programas utilizados para o teste dos esquemas de interpolação foram cedidos por Marchi(1995), Deschamps(1995), Scola(1995).

Os esquemas numéricos podem ser divididos em dois grupos principais quanto à classificação da extensão do esquema escalar feita para resolver o sistemas de equações: solução sequencial e solução simultânea via *solver* de Riemann. Dentro de cada grupo, diferentes categorias foram implementadas e comparadas entre si e com outros grupos. Procura-se verificar a influência dos principais parâmetros na solução do problema.

Os esquemas de interpolação são testados no problema de convecção forçada numa cavidade quadrada. Diversos esquemas já existentes são implementados num mesmo código computacional através de limitadores NVD. Esses esquemas são testados para arranjo co-localizado e desencontrado de variáveis e comparados segundo o perfil de velocidades u na linha vertical que passa pela metade da cavidade.

6.1 Solução Simultânea

O primeiro problema escolhido foi o problema unidimensional do tubo de choque. Esse problema se apresenta como um ótimo teste para os esquemas numéricos de alta resolução por apresentar simultaneamente ondas de choque, rarefações e descontinuidades de contato no campo de densidade. As equações governantes são

$$\begin{aligned}\frac{\partial(\rho A)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u A)}{\partial x} &= 0 \\ \frac{\partial(\rho u A)}{\partial t} + \frac{\partial[(\rho u u + P)A]}{\partial x} &= P \frac{\partial A}{\partial x} \\ \frac{\partial(EA)}{\partial t} + \frac{\partial[(E + P)uA]}{\partial x} &= 0\end{aligned}\tag{6.1}$$

onde a equação de estado é dada pela Eq.(3.40) e a função $A(x)$, para esse problema, é constante em todo o domínio. Isso fará com que o termo fonte da equação de conservação da quantidade de movimento linear seja nulo.

O problema constitui-se de um longo tubo liso com duas câmaras contendo um gás ideal em diferentes pressões e densidades separados por uma membrana. A membrana se rompe subitamente e então os dois estados antes separados pela membrana começam a interagir. Uma onda de alta pressão (onda de choque) se propaga para o interior da câmara de baixa pressão formando um choque enquanto que uma rarefação ocorre na câmara de alta pressão. Como o escoamento não é isotérmico surge uma descontinuidade de contato que se propaga no mesmo sentido da onda de alta pressão. Através dessa descontinuidade não há variação no campo de pressão ou velocidade. O problema é essencialmente transiente e não envolve interações com as fronteiras. Para isso o tempo da solução deve ser tal que as perturbações não cheguem nos volumes dos contornos.

A membrana está posicionada na metade do tubo na posição $x = 0$ e a condição inicial é uma função degrau (Eq. 2.13). Na tabela 6.1 estão listados as condições iniciais dos casos testados no presente trabalho.

Tabela 6.1 - Condições iniciais para os casos testes.

Caso	Estado	Densidade ρ (kg/m ³)	Pressão P (Pa)	Temp. T (K)	Energia E (W)	Velocidade u (m/s)	Compriment o e Δx (m)
1 T. Choque	Esquerda	2,90360	$5,0 \times 10^5$	$6,0 \times 10^2$	$1,25 \times 10^6$	0,0	2000,0
	Direita	0,58072	$1,0 \times 10^5$	$6,0 \times 10^2$	$2,5 \times 10^5$	0,0	20,0
2 T. Choque	Esquerda	0,44500	3,5277	$2,8 \times 10^{-2}$	8,928	0,69888	14,0
	Direita	0,50000	0,5710	$3,9 \times 10^{-3}$	1,4275	0,0	10,0

Para os esquemas tradicionais pode-se definir um fluxo numérico genérico Eqs.(4.65) e obter diferentes esquemas variando a função de viscosidade numérica ψ , definindo-se

$$\Phi_e = \psi(a_e)\alpha_e$$

(6.2)

Para $\psi(a) = a^2$, se obtém o esquema de Lax-Wendroff (1960), para $\psi(a) = 1$, se obtém o esquema de Lax-Friedrichs e para $\psi(a) = |a|$, o método das características locais que, juntamente com a Eq.(4.67), se torna o esquema original de Roe (1981a).

As figuras 6.1, 6.2, 6.3 e 6.4, apresentam alguns dos esquemas tradicionais para o caso 1 da tabela 6.1. Para os esquemas explícitos foi adotado uma condição CFL = 0,95. Os esquemas de interpolação adotam algoritmos implícitos sequenciais. Para solução de problemas compressíveis usa-se o procedimento para qualquer velocidade (Silva e Maliska, 1988; Silva, 1991; Marchi e Maliska, 1994).

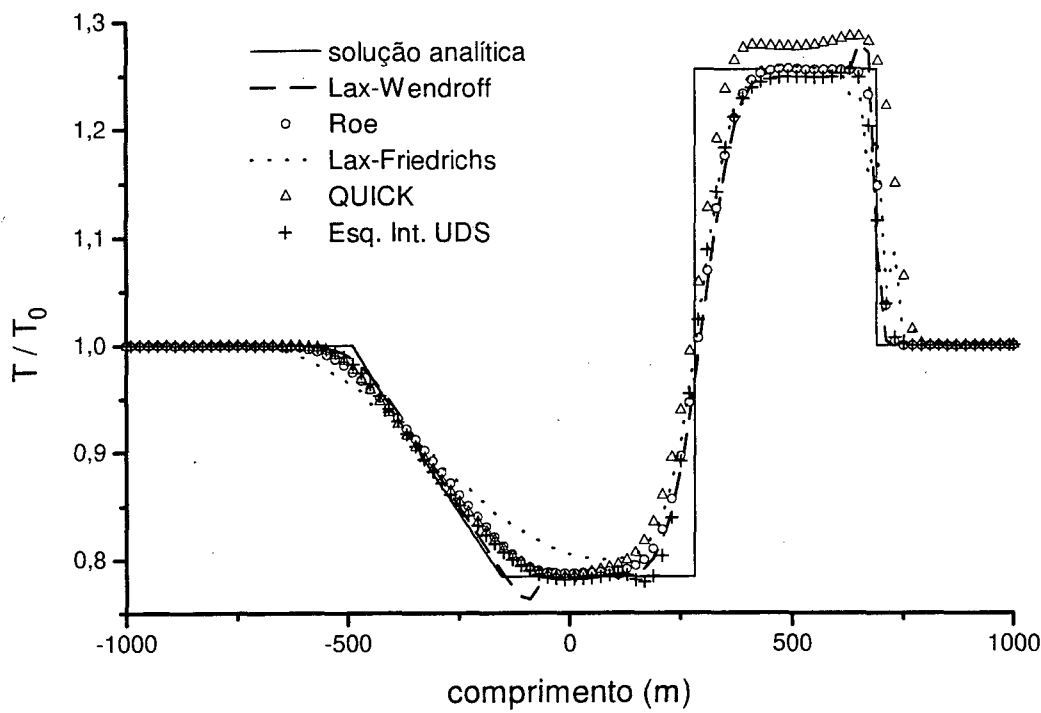


Figura 6.1 - Comparação dos perfis adimensionais de temperatura para diferentes esquemas tradicionais. Tubo de choque, caso 1.

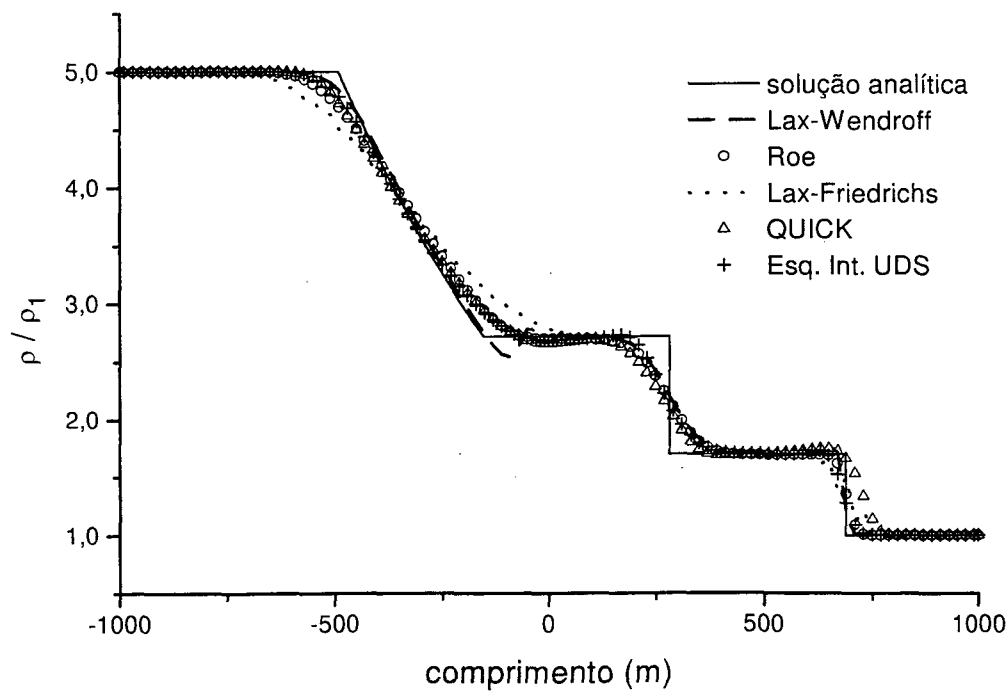


Figura 6.2 - Comparação dos perfis adimensionais de densidade para diferentes esquemas tradicionais. Tubo de choque, caso 1.

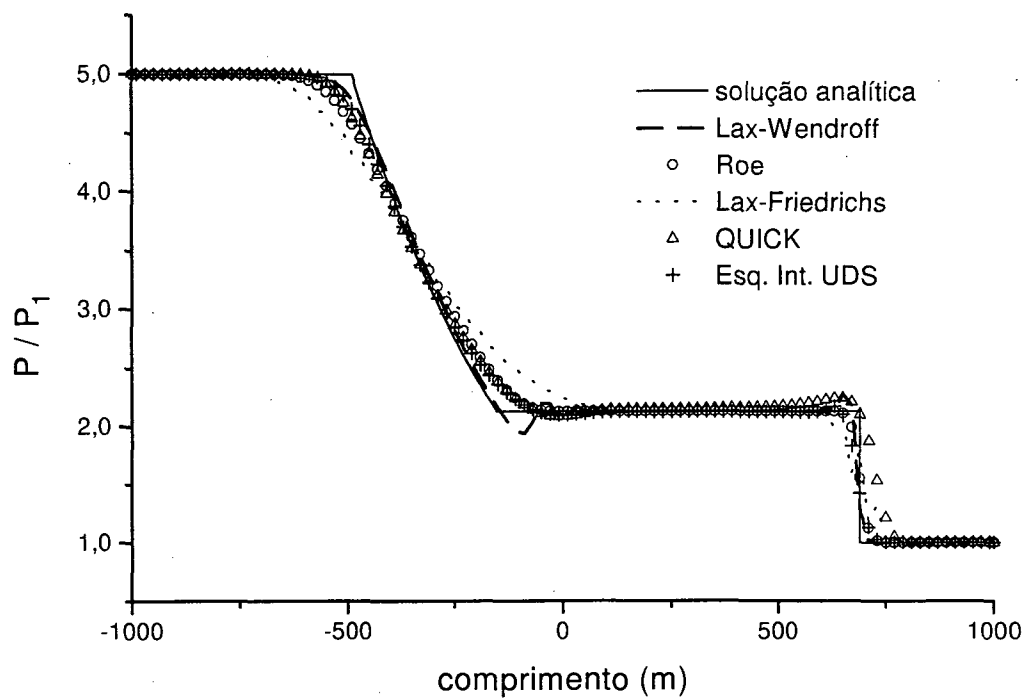


Figura 6.3 - Comparação dos perfis adimensionais de pressão para diferentes esquemas tradicionais. Tubo de choque, caso 1.

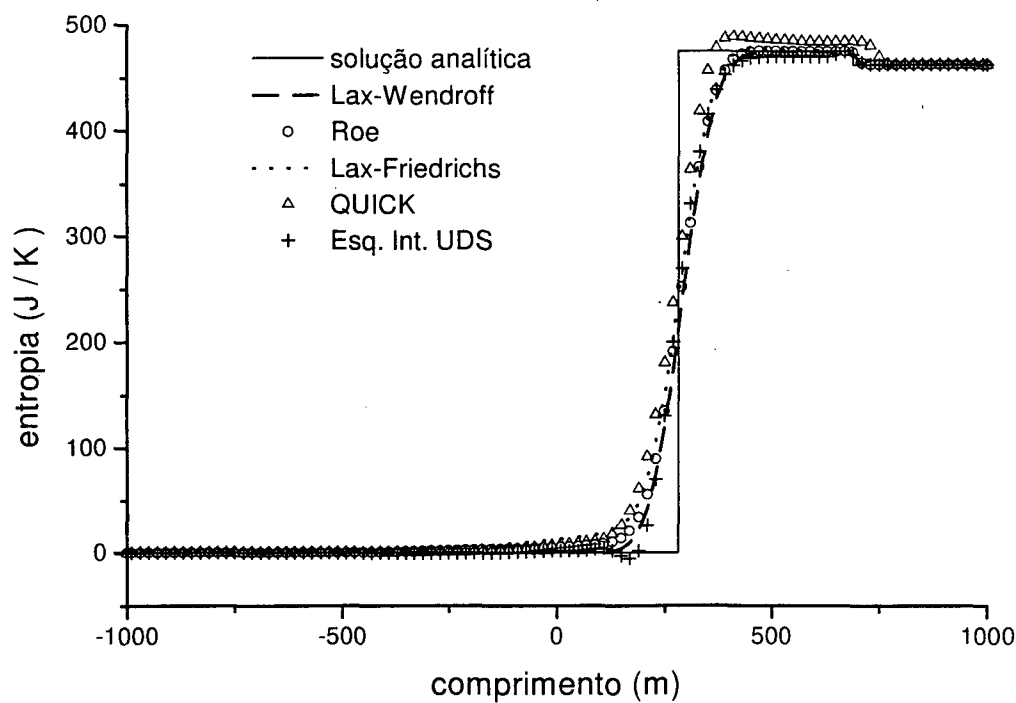


Figura 6.4 - Comparação dos perfis adimensionais de entropia para diferentes esquemas tradicionais. Tubo de choque, caso 1.

Os esquemas conservam as mesmas características do problema escalar. A solução do esquema de Lax-Friedrichs é o mais difusivo dos apresentados. Ele suaviza de tal forma a solução que o patamar inferior não é percebido. A solução do esquema de Roe também é difusivo embora apresente uma quantidade menor de difusão numérica em relação ao esquema de Lax-Friedrichs. Pode-se perceber a formação dos patamares, porém, as descontinuidades continuam excessivamente atenuadas. No esquema de Lax-Wendroff a rarefação e o choque são capturados com poucos pontos, porém oscilações são geradas nas regiões de fortes gradientes indicando que o esquema não possui difusão numérica suficiente nessas regiões.

A solução do esquema de interpolação UDS é próxima do esquema de Roe, porém, na temperatura apresenta uma ligeira oscilação antes da descontinuidade de contato e choque além de diminuir ligeiramente a intensidade do choque. A solução do QUICK apresenta uma boa resolução, no entanto, a posição da frente não está corretamente capturada e a intensidade das descontinuidades estão acima da analítica, indicando haver uma violação da condição de entropia. Na figura 6.4 essa violação é bem visível.

De um modo geral nenhum dos esquemas tradicionais (Lax-Wendroff, Roe, Lax-Friedrichs, e esquemas de interpolação QUICK e UDS) capturaram bem a posição da descontinuidade de contato. O começo e final da rarefação têm suas transições arredondadas. Apesar de apresentar maior oscilação o esquema de Lax-Wendroff possui um perfil de entropia semelhante aos esquemas de primeira ordem, contrariando uma primeira expectativa.

Os esquemas de alta resolução conseguem corrigir as falhas dos esquemas tradicionais obtendo uma melhor captura dos gradientes e, quando existentes, oscilações bastante reduzidas em poucos pontos. Dentro de uma mesma categoria várias opções de limitadores são possíveis. Algumas dessas categorias como os esquemas TVD via limitador de fluxo e TVD simétrico são obtidas como generalizações de esquemas particulares (Sweby, 1984; Yee, 1985). A seguir, as categorias desses esquemas de alta resolução utilizando a aproximação de Roe para o problema de Riemann são comentadas com base no perfil de temperatura para o caso 1 (tabela 6.1) para uma condição de CFL = 0,95.

Na figura 6.5 o esquema TVD via fluxo modificado de Harten (Eqs. 4.22 e 4.23) é comparado com o esquema alterado proposto por Yee (1987a) (Eqs. 4.26, 4.28 e 4.29). Experimentos numéricos indicam uma influência muito pequena do parâmetro de correção de entropia, ϵ , e da função coeficiente de viscosidade numérica (Eq. 4.13) na solução. Nesse trabalho adota-se o valor típico, $\epsilon = 0,1$. Os resultados numéricos utilizando os limitadores das Eqs.(4.26 e 4.28) são idênticos. Em ambos o limitador utilizado é o “minmod”, que introduz menor quantidade de fluxo antidifusivo. Como era de se esperar o limitador da Eq.(4.29) tem a menor difusão numérica uma vez que ele corresponde ao limitador “superbee” (Eq. 4.44) na forma dimensional. Esse limitador é conhecido por maximizar o fluxo antidifusivo introduzido no esquema porém provoca uma pequena oscilação depois da descontinuidade de contato e antes do choque.

Na figura 6.6, o esquema TVD via limitador de fluxo (Sweby, 1984) é apresentado para alguns dos limitadores mais conhecidos: Van Leer (Eq. 4.43), Superbee (Eq. 4.44), Minmod (Eq. 4.45) e Chakravarthy-Osher (Eq. 4.46). Esses esquemas são obtidos a partir de modificações do esquema original de Roe(1981a) (LeVeque, 1990, Cap.16) e por isso seus resultados também foram incluídos tornando mais fácil as comparações com os esquemas tradicionais.

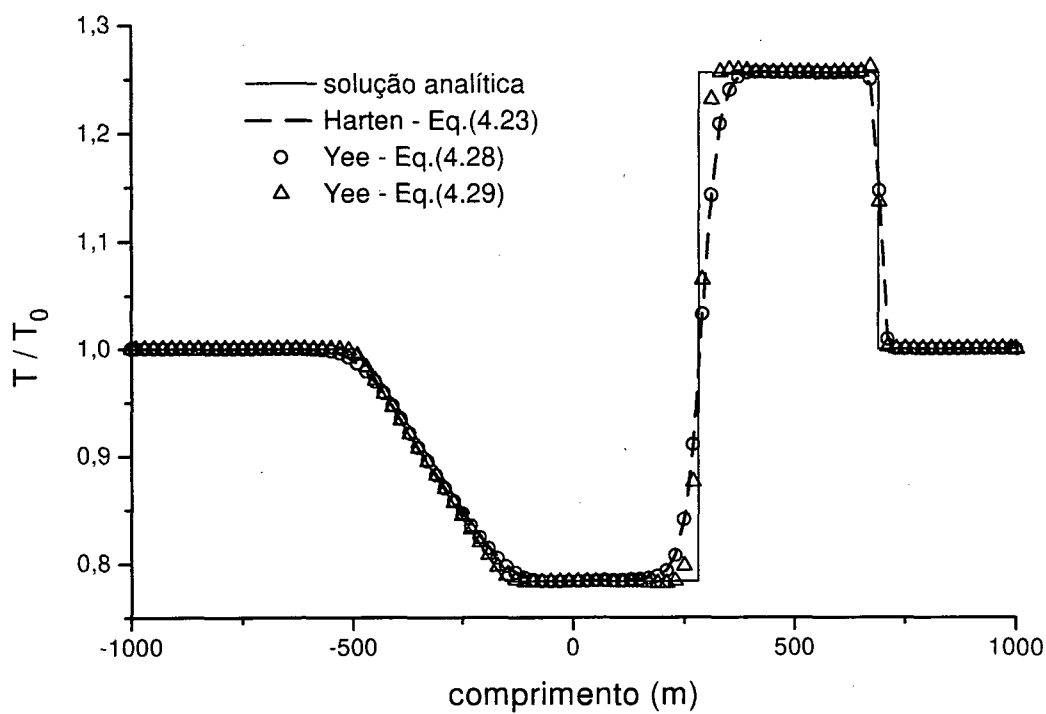


Figura 6.5 - Comparação dos perfis adimensionais de temperatura para diferentes esquemas TVD via fluxo modificado. Tubo de choque, caso 1.

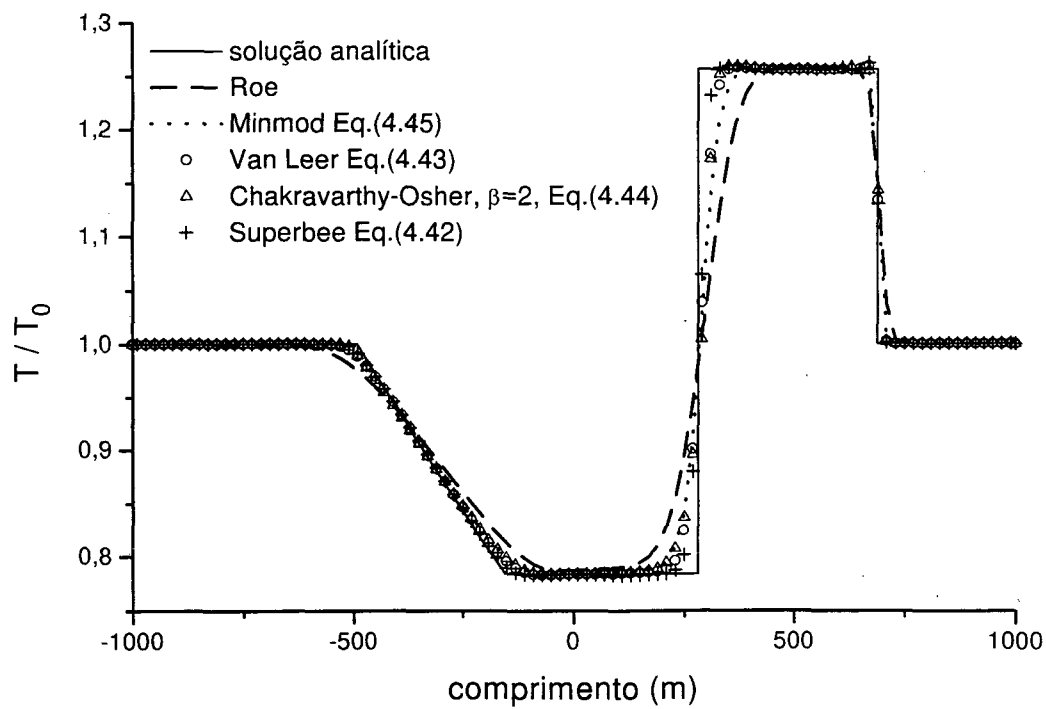


Figura 6.6 - Comparação dos perfis adimensionais de temperatura para diferentes esquemas TVD via limitador de fluxo. Tubo de Choque, caso 1.

O limitador “superbee” (Eq. 4.44) corresponde à maximização do fluxo antidifusivo enquanto que o limitador “minmod” (Eq. 4.45) corresponde à minimização do mesmo. Essa característica se reflete nos resultados numéricos (figura 6.6), onde as soluções para esses limitadores formam a região limite das soluções possíveis para os esquemas TVD via limitador de fluxo. O limitador “superbee”, Chakravarthy e Osher (Eq. 4.46), para $\beta = 2$ e o limitador de Van Leer (Eq. 4.43) apresentam melhor resolução que a do limitador “minmod” mas também apresentaram pequenas oscilações antes do choque. A solução para o limitador “minmod” foi a única que não produziu oscilações. Em relação ao esquema TVD via fluxo modificado (figura 6.5), a descontinuidade de contato é melhor capturada.

Os esquemas TVD simétrico (Yee, 1987b) apresentam pouca variação do resultado de acordo com o limitador. Na figura 6.7 os perfis de temperaturas obtidos com os limitadores das Eqs.(4.56, 4.57 e 4.58) são praticamente coincidentes. Em relação ao esquema TVD via limitador de fluxo, o choque, e em especial a descontinuidade de contato, não são capturadas com a mesma eficiência, porém nenhum dos limitadores testados provocou oscilações.

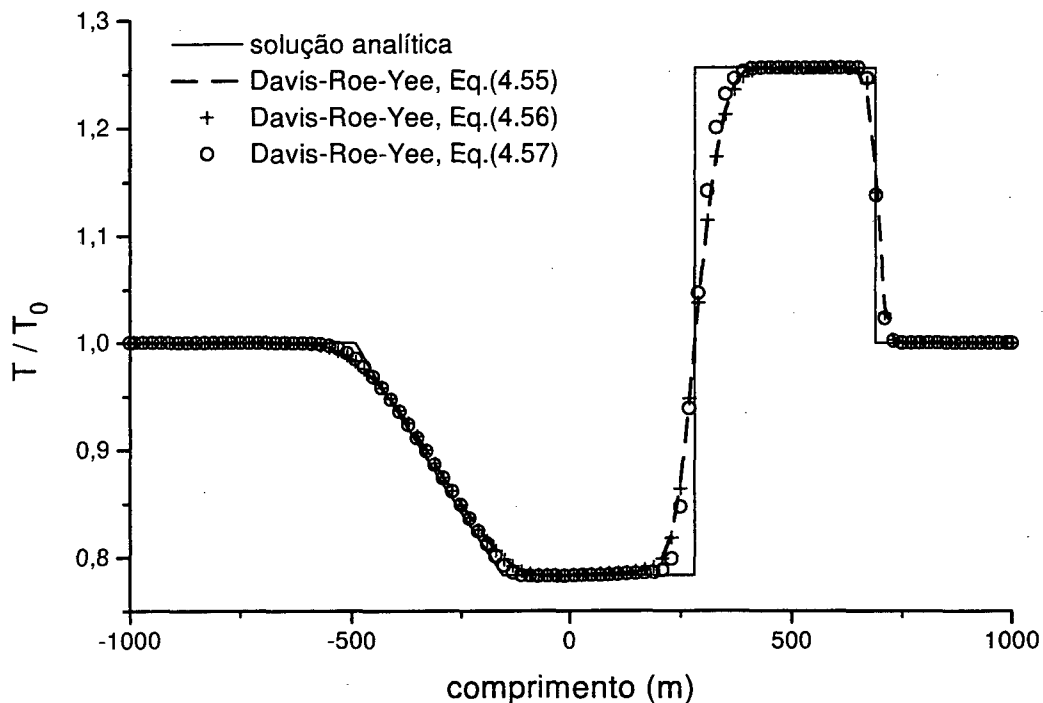


Figura 6.7 - Comparação dos perfis adimensionais de temperatura para diferentes esquemas TVD simétricos. Tubo de choque, caso 1.

Nas figuras 6.8, 6.9, 6.10 e 6.11 os esquemas TVD de alta resolução são comparados entre si para os perfis de temperatura, densidade, pressão e entropia. Do esquema TVD via fluxo modificado utilizar-se-á o esquema original de Harten (Eq. 4.23). Do esquema TVD via limitador de fluxo (Sweby, 1984) utilizar-se-ão os limitadores “superbee” (Eq. 4.44) e o de Van Leer (Eq. 4.43). Do esquema TVD simétrico, referido como esquema geral de Davis (1984), se optou por

se utilizar o limitador da Eq.(4.56) por questões de simplicidade. O esquema original de Roe também é apresentado para fins de comparação.

De uma maneira geral, todos os esquemas TVD de alta resolução apresentaram desempenho melhor que os esquemas tradicionais. Os resultados obtidos tiveram um aumento na ordem de precisão, mas houve o surgimento de pequenas oscilações em alguns limitadores. A posição das descontinuidades e sua intensidade foram captadas corretamente. O esquema de Roe obteve sempre a solução com menor resolução. Na descontinuidade de contato é onde se encontrou alguma variação de acordo com o esquema numérico escolhido, apesar da aproximação de Roe (1981a) para o problema de Riemann ser exata em choques e descontinuidades de contato (LeVeque, 1990, Cap.14). O começo e final da rarefação são melhor capturados.

O esquema TVD simétrico (Eq. 4.56) foi o que apresentou resultado mais difusivo dentro dos esquemas de alta ordem. O esquema TVD via limitador de fluxo com o limitador “superbee” (Eq. 4.44) foi o que apresentou menor difusão embora ela fosse necessária para evitar as pequenas oscilações que surgissem. O esquema TVD com o limitador de Van Leer (Eq. 4.43) obteve soluções com boa resolução embora tenha oscilado ligeiramente antes do choque. Vale a pena comentar que a oscilação provocada por esses dois limitadores são em geral aceitas, pois não descaracterizam a solução. O esquema TVD via fluxo limitado de Harten (Eq. 4.23) apresentou resultados monótonos e de alta resolução.

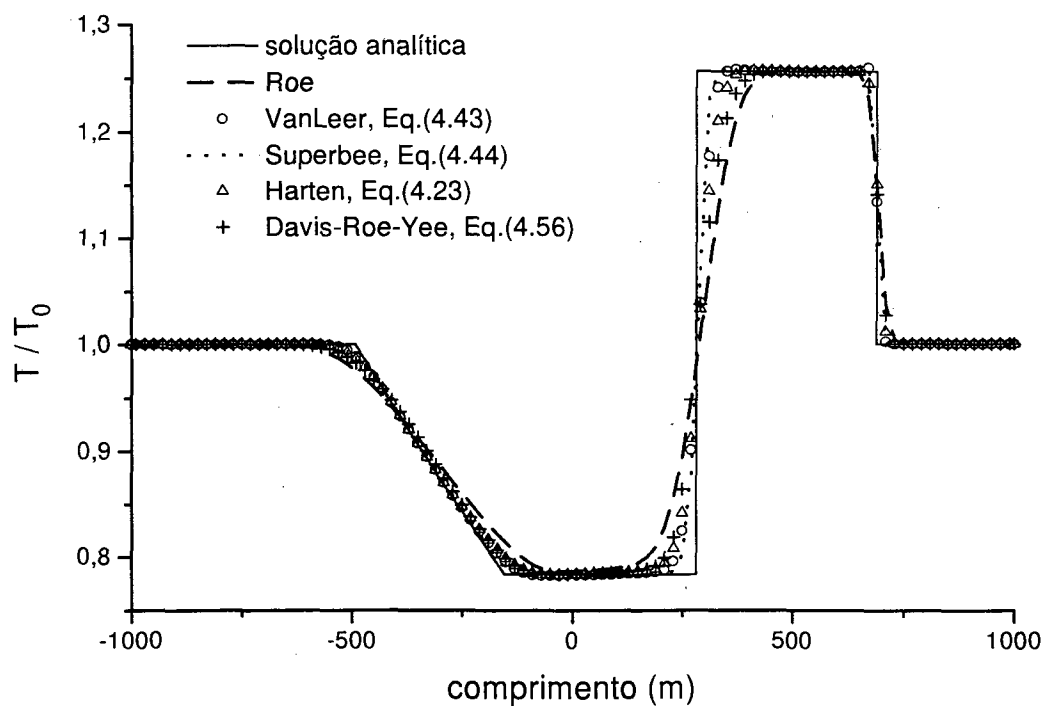


Figura 6.8 - Comparação dos perfis adimensionais de temperatura para esquemas TVD de diferentes categorias. Tubo de choque, caso 1.

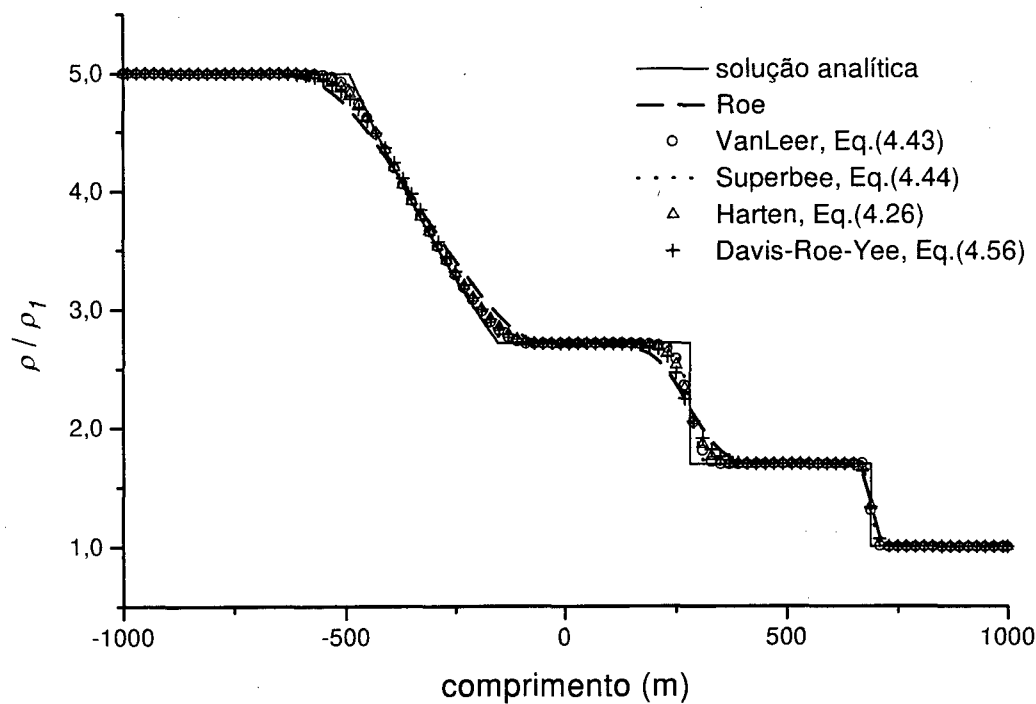


Figura 6.9 - Comparação dos perfis adimensionais de densidade para esquemas TVD de diferentes categorias. Tubo de choque, caso 1.

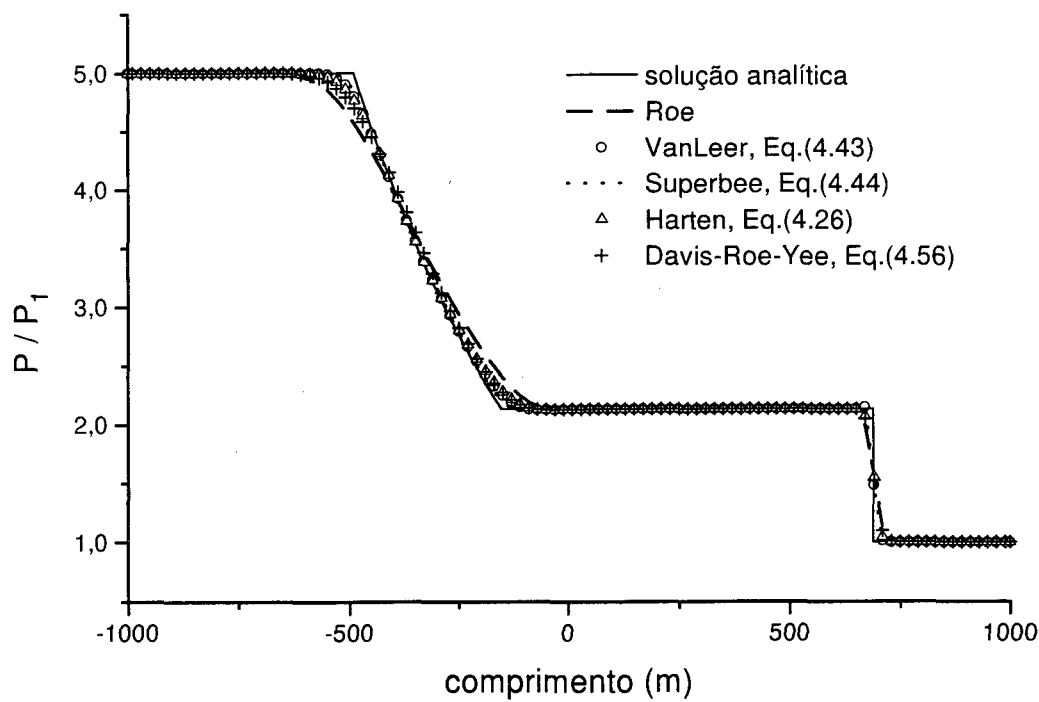


Figura 6.10 - Comparação dos perfis adimensionais de pressão para esquemas TVD de diferentes categorias. Tubo de choque, caso 1.

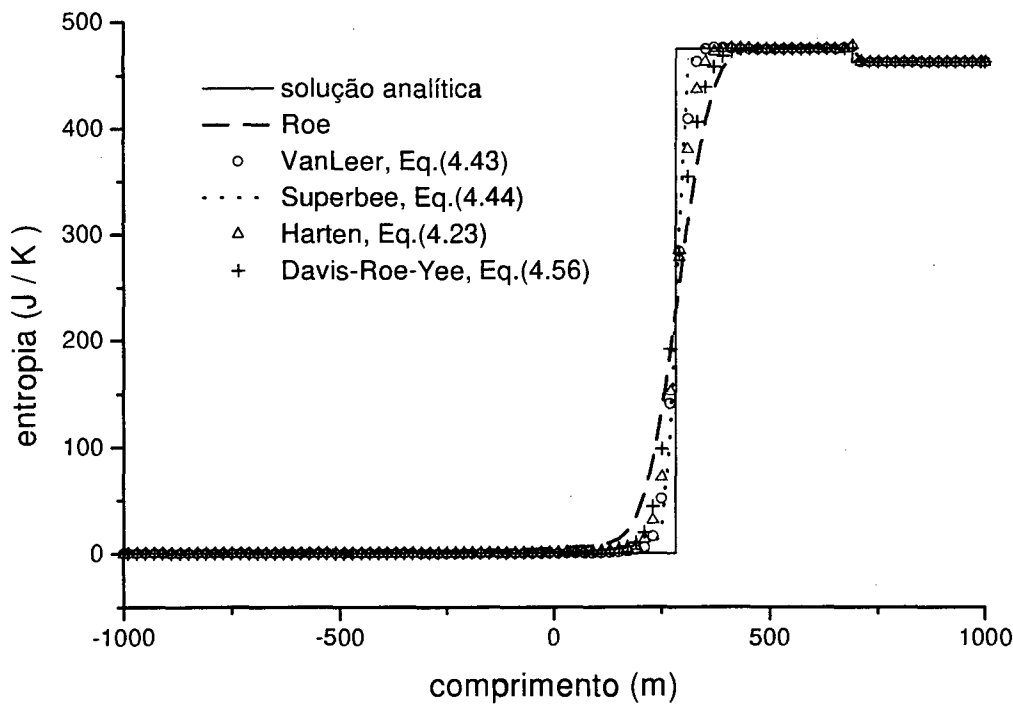


Figura 6.11 - Comparação dos perfis de entropia para esquemas TVD de diferentes categorias. Tubo de choque, caso 1.

6.2 Solução Sequencial

Um dos objetivos desse trabalho é levar os esquemas de alta resolução, que foram desenvolvidos para algoritmos de solução simultânea para algoritmos sequenciais. Até o momento todos os algoritmos apresentados foram implementados de forma simultânea procurando utilizar as mesmas metodologias dos primeiros trabalhos nessa área (Harten, 1983; Sweby, 1984; Yee, 1987b). Os algoritmos sequenciais podem ser facilmente modificados para incluir novas equações sem ser necessário reformulá-los inteiramente. Como não há cálculo de matrizes jacobianas basta acrescentar poucas linhas de chamada de subrotinas.

Na solução sequencial o sistema de equações de Euler (Eq. 4.59) é considerado um conjunto de leis de conservação hiperbólicas escalares separadas. Os esquemas TVD são aplicados escalarmente em cada uma das variáveis conservativas (massa, quantidade de movimento linear e energia total). As velocidades características são avaliadas de acordo com a Eq.(4.12). A seguir serão apresentados os resultados para essa abordagem. Essas idéias foram desenvolvidas em paralelo ao trabalho de Thakur e Shyy (1993) e testadas no problema do tubo de choque para o caso 2 da tabela 6.1.

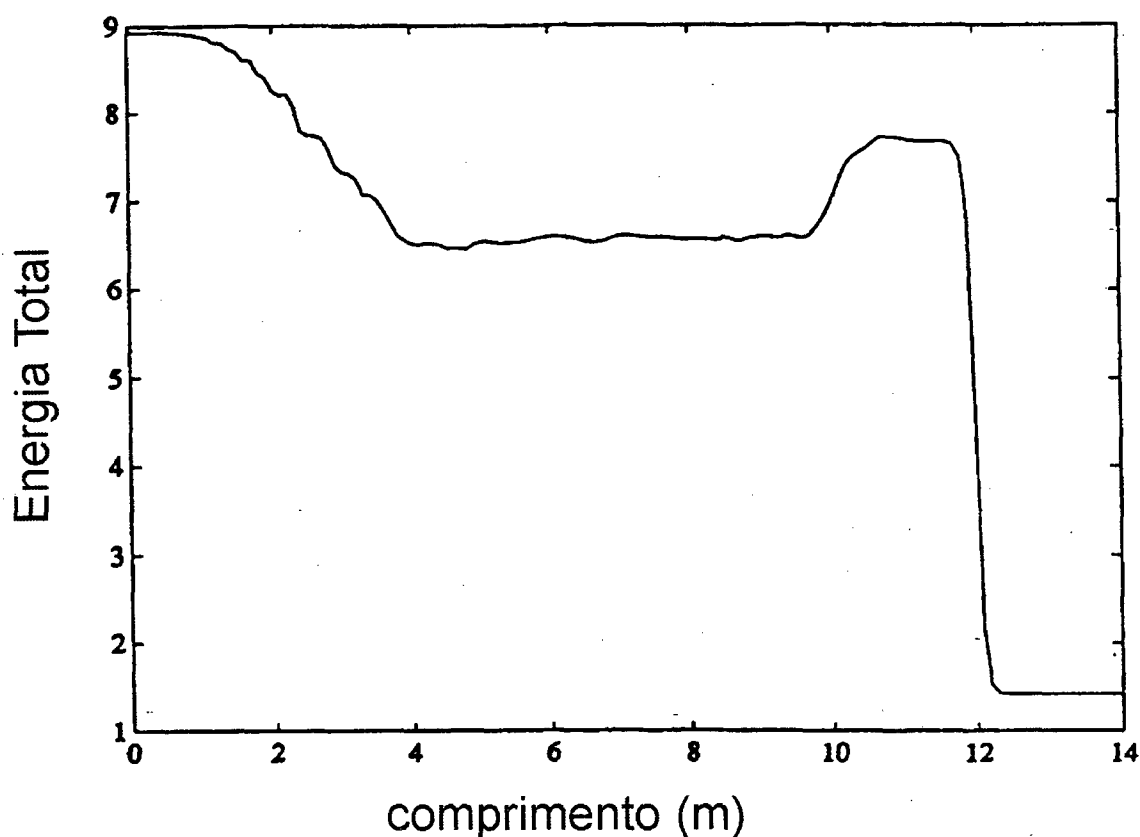


Figura 6.12 - Perfil de energia total no tubo de choque, caso 2 (tabela 6.1), obtido por Thakur e Shyy (1993), $\varepsilon = 0,2$ e $\lambda = 0,1$.

Na figura 6.12 é apresentada a solução de Thakur e Shyy(1993). Nesse trabalho o esquema sequencial é testado para um parâmetro de correção de entropia , $\varepsilon = 0,2$ (Eq. 4.13) e $\lambda = 0,1$ o que significa fixar $\Delta t = 0,01$ s. O CFL portanto é variável mas é mantido abaixo do valor crítico ($CFL = 1,0$). No presente trabalho optou-se por manter o CFL fixo e calcular o Δt a cada passo de tempo. Depois de alguns testes resolveu-se avaliar o CFL baseado no maior autovalor da matriz jacobiana associada às equações de Euler (Eqs. 4.60 e 4.61). Na figura 6.13 são apresentados os resultados para diferentes valores de CFL.

Observou-se que o esquema numérico se torna bastante sensível a parâmetros, antes não observados nos algoritmos simultâneos, como o CFL. Os resultados compatíveis com os de Thakur e Shyy (1993) foram obtidos para $CFL = 0,4$. Com esse CFL foi observado um Δt médio de 0,0105 s. Para o CFL baseado na velocidade característica definida pela Eq.(4.12), observou-se valores de Δt muito pequenos. Segundo Thakur e Shyy (1993), isso é a manifestação que as velocidades características das três equações são diferentes levando a uma propagação assíncrona das variáveis físicas. Não só o aumento no parâmetro de correção de entropia, ε , pode ser interpretado como uma introdução de dissipação artificial no esquema numérico, mas também a diminuição do CFL tem efeito semelhante. A propagação da informação para atingir um volume vizinho, para $CFL \ll 1$, necessitaria de vários passos de tempo. Em cada passo de tempo médias seriam feitas destruindo o perfil inicial da solução.

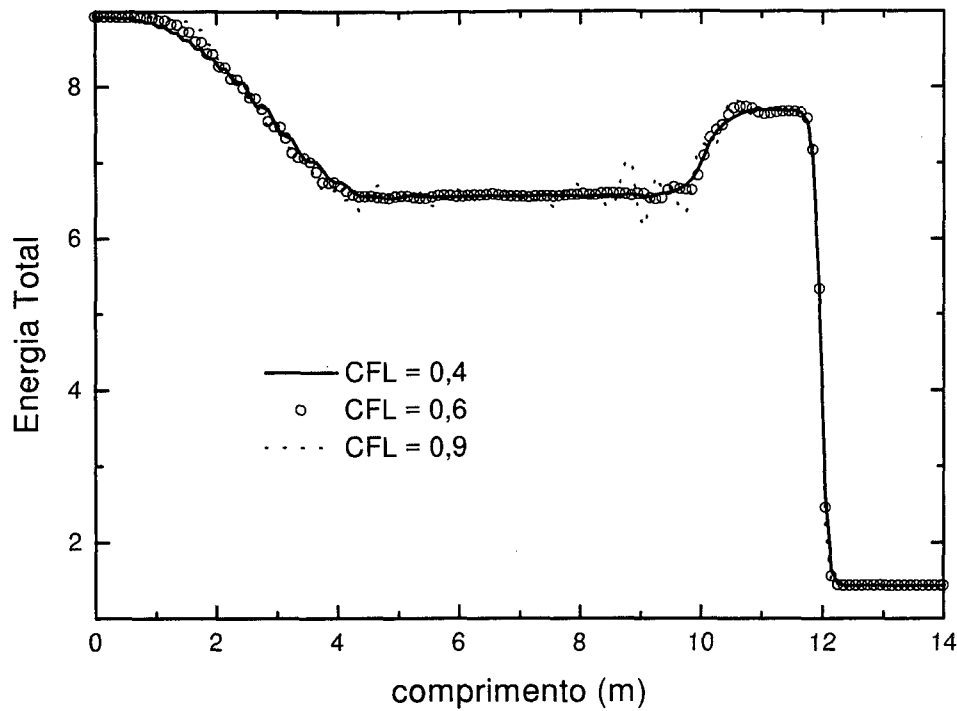


Figura 6.13 - Perfil de energia total no tubo de choque, caso 2 (tabela 6.1), obtido no presente trabalho para $\epsilon = 0,2$.

Para explorar um pouco mais algumas características de esquemas com essa abordagem, considere a solução numérica do escoamento compressível num bocal divergente com entrada em regime supersônico e saída subsônica. A solução desse escoamento contém um choque normal estacionário cuja posição varia de acordo com a condição de saída. Esse tipo de problema não foi estudado por Thakur e Shyy (1993). No presente trabalho a seção do bocal na Eq.(6.1), varia de acordo com a função

$$A(x) = 1,398 + 0,347 \tanh(0,8 x - 4,0) \qquad 0 \leq x \leq 10 \qquad (6.3)$$

Condições de contorno são definidas na tabela 6.2 para que o choque ocorra na posição, $x = 4,0m$. As condições correspondem a uma pressão de estagnação antes do choque, $P_0 = 101,3KPa$ e temperatura de estagnação, $T_0 = 300K$. O domínio físico é dividido em 100 volumes de controle elementares. Para a entrada supersônica, uma análise das equações características (Eq. 4.64) indica que todas a variáveis devem ser prescritas. Na saída subsônica essa análise indica que apenas a energia total ou pressão devem ser prescritas.

Nos contornos o esquema não possui os cinco pontos para calcular todos os parâmetros internos e por isso ele se degenera nessa região. Nos programas feitos para realizar os testes numéricos as condições de contorno foram implementadas via pontos na fronteira dos volumes.

Tabela 6.2 - Condições de contorno para bocal divergente.

	Entrada	Saída
Densidade (kg / m³)	0,62491	1,03022
Velocidade (m / s)	367,10	134,16
Pressão (Pa)	41.773,91	86.053,09
Temperatura (K)	232,91	291,04
Energia Total (W)	146542,72	224404,72

Na figura 6.14 são apresentados os perfis de temperatura do bocal divergente para os esquemas TVD simétrico e o de fluxo modificado via aproximação de Roe (1981a) em solução simultânea, e o esquema TVD de fluxo modificado em solução sequencial. O resultado da solução sequencial de segunda ordem é ligeiramente mais difusivo que os de solução simultânea. Sem a atuação dos termos de alta resolução a solução dos esquemas simultâneos não suavizam tanto o choque como a do esquema sequencial.

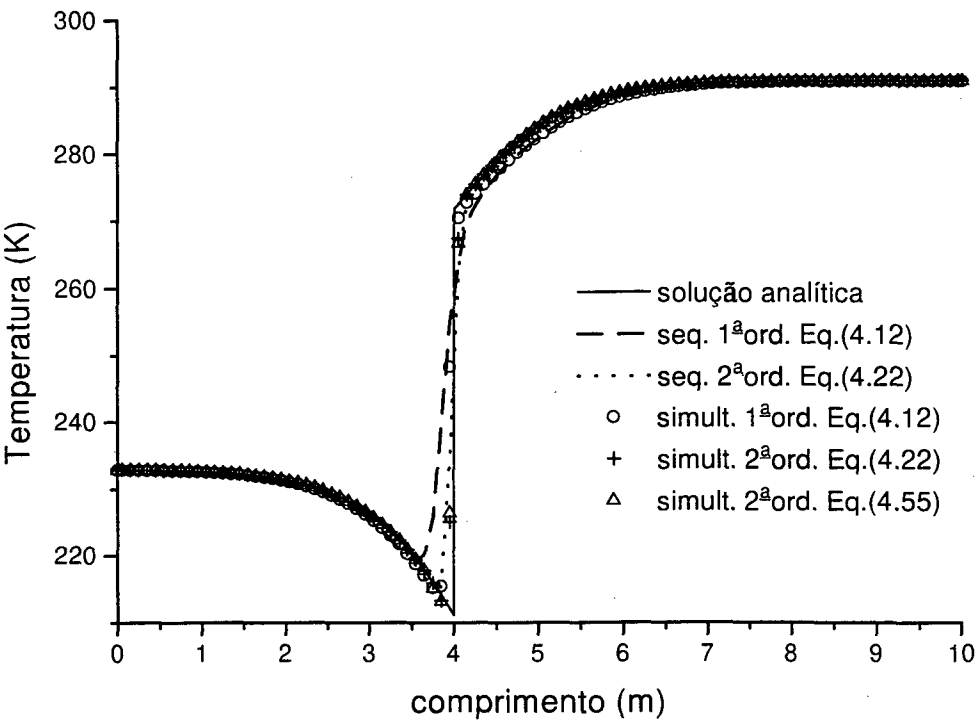


Figura 6.14 - Perfil de temperatura ao longo do bocal divergente.

Em termos de convergência, os termos de alta resolução dificultam a convergência da solução em ambos os esquemas, sendo que no algoritmo sequencial, com primeira ordem, o resíduo cai a nível do erro de máquina, usando precisão dupla. A definição resíduo normalizado usado como critério de convergência em regime permanente adotado nesse trabalho é dado por

resíduo cai a nível do erro de máquina, usando precisão dupla. A definição resíduo normalizado usado como critério de convergência em regime permanente adotado nesse trabalho é dado por

$$R = \frac{\phi^{n+1} - \phi^n}{\phi_{max}^{n+1} - \phi_{min}^{n+1}} \quad (6.4)$$

Observou-se que os resíduos da quantidade de movimento linear estabilizam-se num patamar ligeiramente acima dos demais. Por esse motivo a curva de resíduo dessa propriedade foi escolhida para as comparações.

Na figura 6.15 percebe-se que os esquemas simultâneos de alta resolução não conseguem diminuir o resíduo como os seus correspondentes de baixa ordem para um mesmo valor do parâmetro de correção de entropia, ϵ . Os resultados apresentados são para uma condição $CFL \leq 0,75$ e $\epsilon = 0,1$. Eles são menos sensíveis ao parâmetro ϵ e não apresentam alterações significativas quando ele é variado.

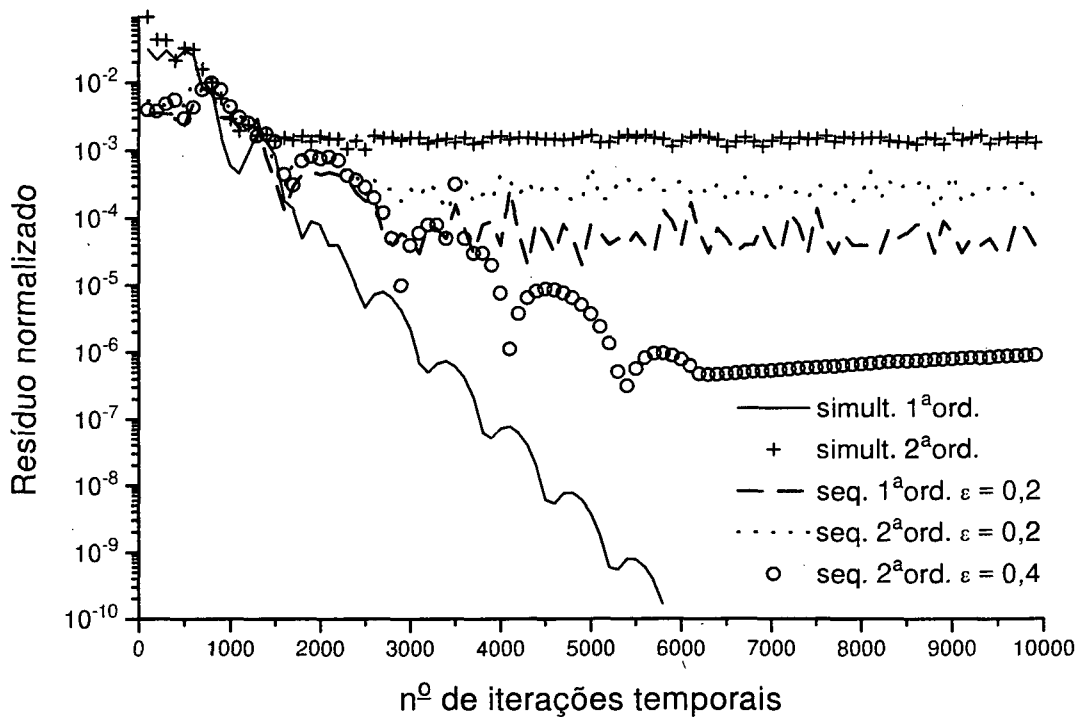


Figura 6.15 - Resíduo normalizado da quantidade de movimento linear no bocal divergente para solução sequencial e simultânea.

O esquema sequencial, no entanto, necessita de uma maior quantidade de dissipação e demonstrou ser sensível ao parâmetro de correção de entropia, ϵ . Os resultados apresentados são para uma condição $CFL \leq 0,4$ e o parâmetro ϵ foi testado de 0,1 a 0,6. Para $\epsilon \leq 0,2$ o resíduo não diminui além de 10^{-4} . Esse resultado melhora para $\epsilon = 0,4$ onde inicialmente o resíduo cai na ordem de 10^{-8} , porém, sem estabilizar nesse patamar. Testes com até 80.000 iterações temporais, não apresentados, mostraram que o resíduo volta a subir até estabilizar em 9×10^{-6} a partir de

52.000 iterações e para $\varepsilon = 0,6$, a solução apresentou comportamento muito semelhante da anterior, estabilizando em 9×10^{-6} em 32.000 iterações temporais. O esquema TVD simétrico (Eqs. 4.55 e 4.56), não apresentado, se comporta de forma semelhante ao TVD de fluxo modificado, porém num patamar de 10^{-5} .

Os esquemas TVD via fluxo modificado e simétrico reduzem-se a Eq.(4.10) quando os termos de alta ordem, g na Eq.(4.22) e \hat{Q} na Eq.(4.55), são desativados. A boa performance do esquema simultâneo de primeira ordem se deve à qualidade da aproximação de Roe para o problema de Riemann.

Para um problema unidimensional em regime permanente o fluxo de massa deve ser constante em todo o domínio. Para melhor analisar essa característica define-se o erro de massa como sendo a diferença percentual do fluxo local pelo fluxo prescrito, ou seja

$$\text{Erro de massa} = \frac{\dot{m}_{\text{local}}}{\dot{m}_{\text{prescrito}}} - 1 \quad (6.5)$$

Nesse trabalho, o fluxo local foi avaliado nas faces e nos centros (nós) dos volumes. Na figura 6.16, para o erro de massa avaliado na face não foi observado violação da conservação da massa através do choque. Isso confirma a forma conservativa (Eq. 2.17) que impõe a conservação a nível de volume de controle na equação discretizada. Quando o erro de massa é avaliado nos centros (nós) dos volumes observa-se um erro na região do choque, independente do esquema numérico ou sua ordem (figura 6.17). Para entender esse comportamento, diferente do anterior, deve-se lembrar que ϕ_p representa um valor médio da propriedade no volume de controle, que envolve os erros de truncamento, e não o seu valor pontual, $\phi(x)$.

Espera-se que quanto maior for a ordem do esquema numérico menor será o erro de massa para propriedade avaliada no nó. Na figura 6.17, as curvas de erro de massa dos esquemas simultâneos confirmam essa expectativa. Os esquemas seqüenciais não diminuíram a magnitude do erro, porém diminuíram a região onde ele ocorre. Atribui-se as oscilações na região de saída para a solução do esquema TVD via fluxo modificado simultâneo à perturbações introduzidas pela condição de contorno. Para os resultados apresentados foi utilizado uma extrapolação linear nas variáveis físicas no esquema seqüencial e variáveis características no simultâneo. Os esquemas TVD simétricos simultâneo e TVD via fluxo modificado seqüencial não demonstraram oscilações no contorno.

A avaliação da velocidade característica pela Eq.(4.12) em algoritmos seqüenciais gera uma indefinição na equação da conservação da quantidade de movimento linear. Sendo o problema unidimensional e em regime permanente, a variável conservada, $\rho u A$, é constante em todo o domínio levando a uma divisão por “zero”. Pela definição da Eq.(4.12) no esquema seqüencial não se conseguiu fazer nenhum raciocínio físico velocidade característica ao contrário do esquema simultâneo onde ela está associada a velocidade de propagação variável característica (Eq. 4.63).

Os termos de alta resolução são ativados sempre há um “salto” na propriedade conservada $[\Delta_c(\phi) \neq 0]$. Caso haja um erro na conservação da massa, esse desbalanço ativará os termos “inteligentes” dos esquemas TVD no sentido de diminuí-lo. Por essa razão se espera que os esquemas de alta ordem tenham um erro na conservação da massa numa região menor que os de primeira ordem. Nessa comparação todos os esquemas foram compilados em precisão dupla.

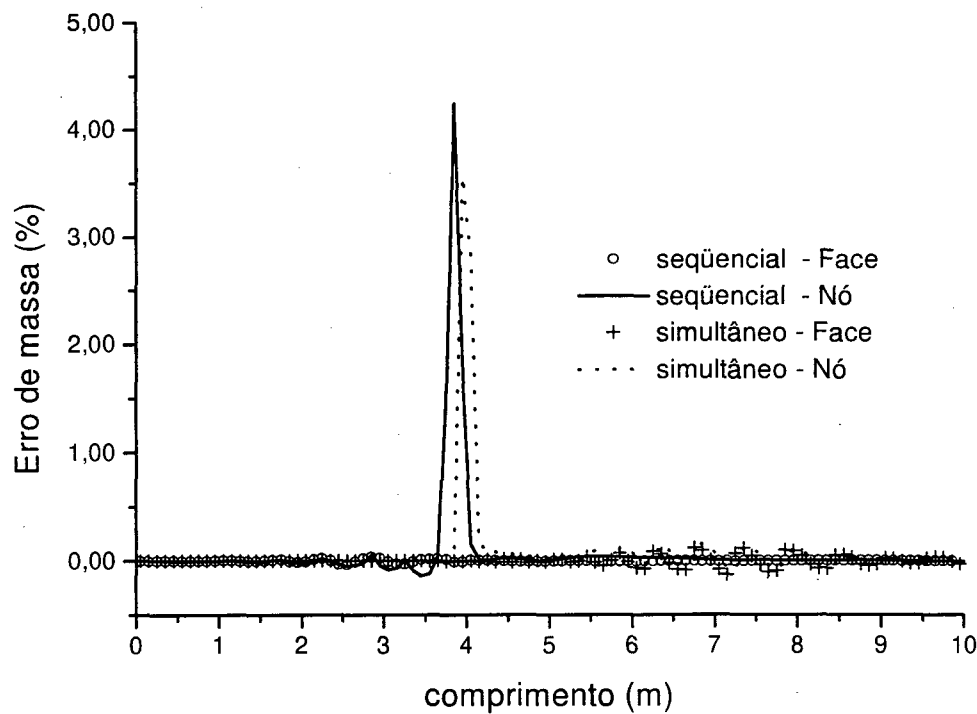


Figura 6.16 - Erro de massa para esquemas TVD via fluxo modificado de 2ª ordem (Eq. 4.22) avaliado no nó e na face.

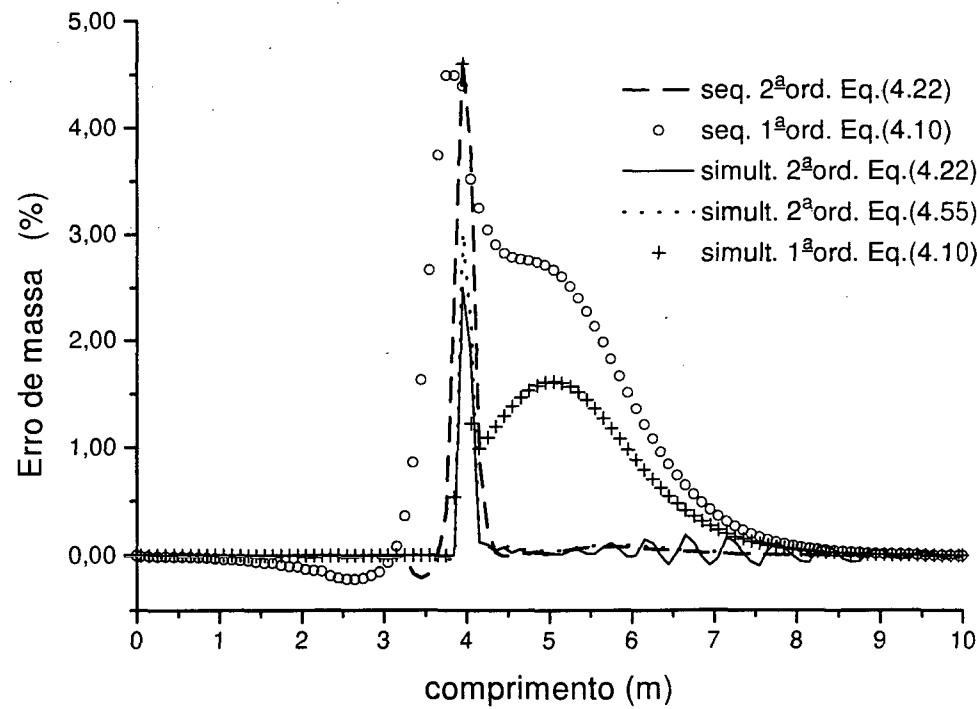


Figura 6.17 - Erro no balanço de massa para esquemas seqüenciais e simultâneos no bocal divergente avaliados nos nós.

Para o erro de massa avaliado nas faces observou-se que a propriedade conservativa dos esquemas foi mantida na discretização. Para esquemas de primeira ordem, não apresentados, não houve oscilações em nenhum dos esquemas.

De uma forma geral os esquemas testados, seqüencial ou simultâneo, garantiram a conservação da massa, inclusive através do choque. Apenas o TVD via fluxo modificado simultâneo apresentou oscilações fora da região do choque devido à condição de contorno. Para o erro de massa avaliado no nó pôde-se a influência da ordem e tipo de solução do esquema numérico. O erro para os esquemas de primeira ordem são os de maior magnitude e diminuem gradativamente depois do choque. Os esquemas de segunda ordem diminuem a região do erro ao redor do choque, sendo que os esquemas simultâneos conseguiram diminuir sua magnitude. O esquema seqüencial apresentou um erro de 4,5% em primeira e segunda ordem. O esquema simultâneo também apresentou um erro de 4,5% para primeira ordem mas caiu para 2,5% e 3,0% para o esquema TVD de fluxo modificado (Eq. 4.22) e TVD simétrico (Eq. 4.55) de segunda ordem, respectivamente. Os valores encontrados são compatíveis com os apresentados por Hirsch (1988, Cap.21). Para o um escoamento supersônico no bocal divergente (sem choque) o erro de massa fica abaixo de 0,1% no simultâneo e 0,05% no seqüencial.

O perfil de entropia (figura 6.18) do esquema seqüencial de primeira ordem se afasta mais da solução analítica que o perfil do esquema simultâneo de mesma ordem. O esquema seqüencial de segunda ordem apresenta oscilação antes e depois do choque. Os esquemas simultâneos de segunda ordem oscilaram antes do choque de forma semelhante, sendo que apenas o TVD de fluxo modificado (Eq. 4.22) oscilou, numa escala menor, depois do choque. As oscilações e discrepâncias entre o perfil de entropia e o valor analítico acompanham o comportamento do erro de massa avaliado nos nós.

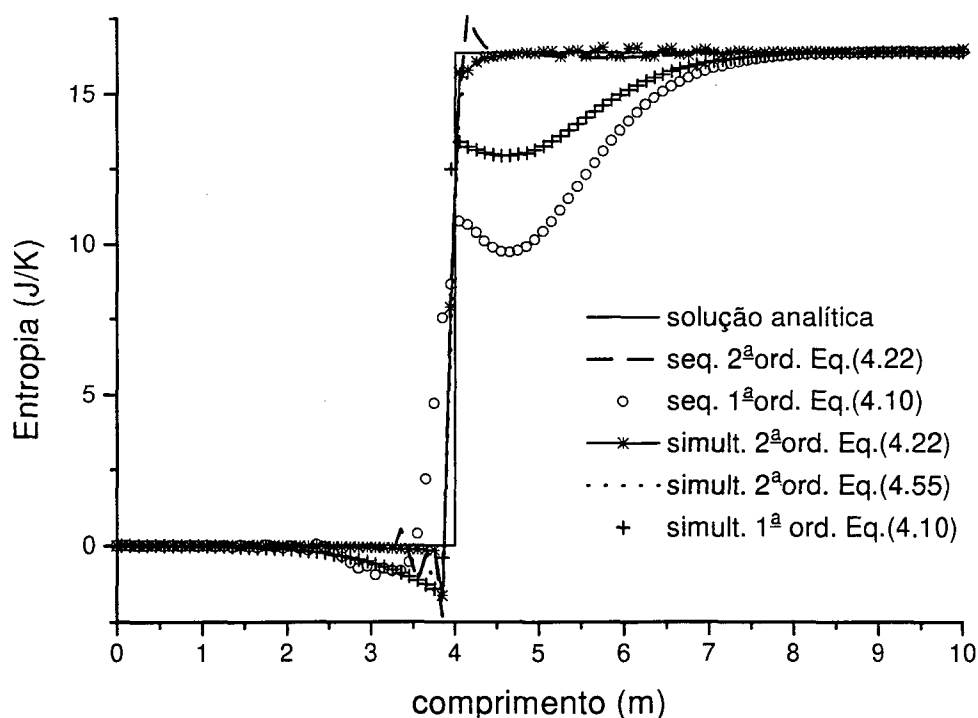


Figura 6.18 - Perfil de entropia para esquemas seqüenciais e simultâneos no bocal divergente.

6.2.1 Uniformização das Velocidades Características

Para contornar o problema de assincronia dos esquemas sequenciais Thakur e Shyy(1993) propõem uma nova abordagem para se uniformizar as velocidades de propagação das propriedades físicas em todas equações. Nessa abordagem a nova velocidade característica considerada é a velocidade convectiva. Para que isso ocorra, apenas as parcelas contendo o produto da variável conservada pela velocidade convectiva são consideradas como termo convectivo. O restante é passado para o outro lado do sinal da igualdade e então é tratado como um termo fonte. As Eq. de Euler podem então ser escritas da seguinte forma,

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho A)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u A)}{\partial x} &= 0 \\ \frac{\partial(\rho u A)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u u A)}{\partial x} &= -\frac{\partial(PA)}{\partial x} + P \frac{\partial A}{\partial x} \\ \frac{\partial(EA)}{\partial t} + \frac{\partial(Eu A)}{\partial x} &= -\frac{\partial(Pu A)}{\partial x} \end{aligned} \quad (6.6)$$

A velocidade característica por essa abordagem é definida pela média aritmética simples,

$$a_e = \frac{1}{2}(u_p + u_E) \quad (6.7)$$

Os termos fontes podem ser tratados de formas especiais. Os esquemas TVD não podem garantir suas propriedades na presença de termos fontes a não ser em casos especiais (Yee, 1987b). No presente trabalho esse termos são tratados explicitamente. Thakur e Shyy(1993) testaram alguns tratamentos especiais para os termos fontes.

Os resultados para o esquema TVD de fluxo modificado são apresentados na figura 6.19 para todas as abordagens discutidas no presente capítulo. Apesar do ganho na diminuição do resíduo não se percebe melhoria nos resultados em relação a abordagem anterior. O comportamento do erro de massa permanece o mesmo. Ele não diminui e nem a região onde ele ocorre se estreita. O mesmo comportamento vale para o perfil de entropia.

Na figura 6.20 é apresentado o comportamento do resíduo em função do parâmetro de correção de entropia. Verificou-se que nessa abordagem, o resíduo da quantidade de movimento linear fica ligeiramente abaixo dos outros, porém, ele será mantido para permitir comparações com a figura 6.15. Para valores pequenos como $\varepsilon = 0,2$, o resíduo não consegue diminuir, estabilizando em 10^{-2} . Para $\varepsilon = 0,3$, o resíduo cai abaixo do esquema com velocidades características não-uniformizadas (Eq. 4.12) estabilizando em 10^{-8} e não apresenta tendência de subir como anterior. Para $\varepsilon = 0,4$, o resíduo diminui indefinidamente até a precisão de máquina. Para $\varepsilon \geq 0,4$ esse comportamento se mantém.

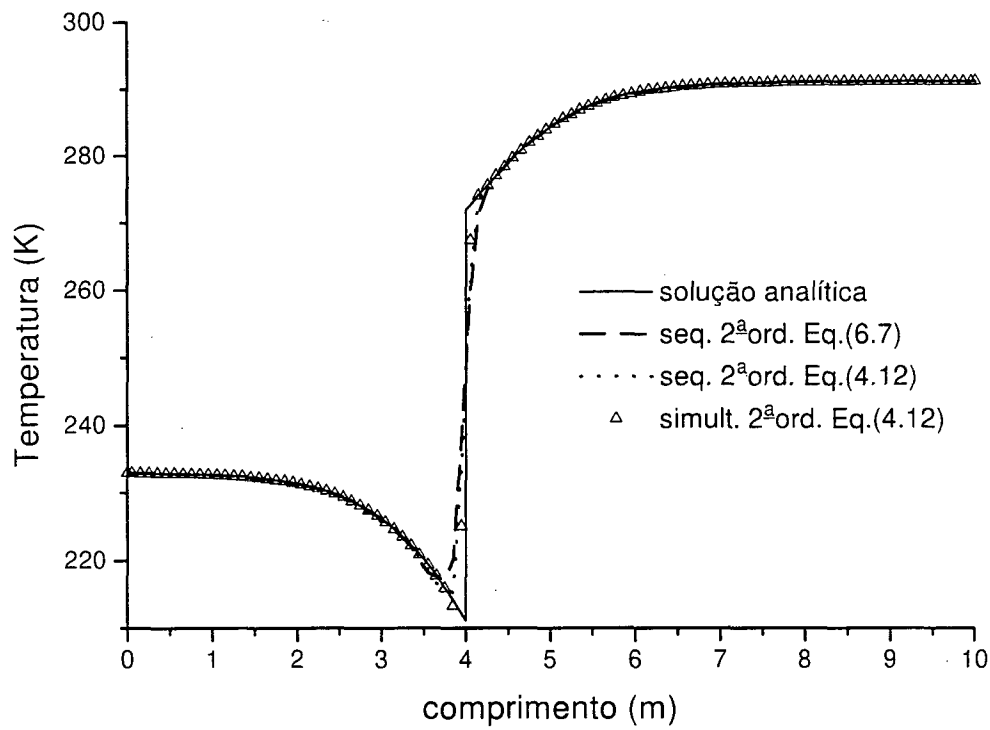


Figura 6.19 - Perfis de temperatura para o esquema TVD de fluxo modificado no bocal divergente.

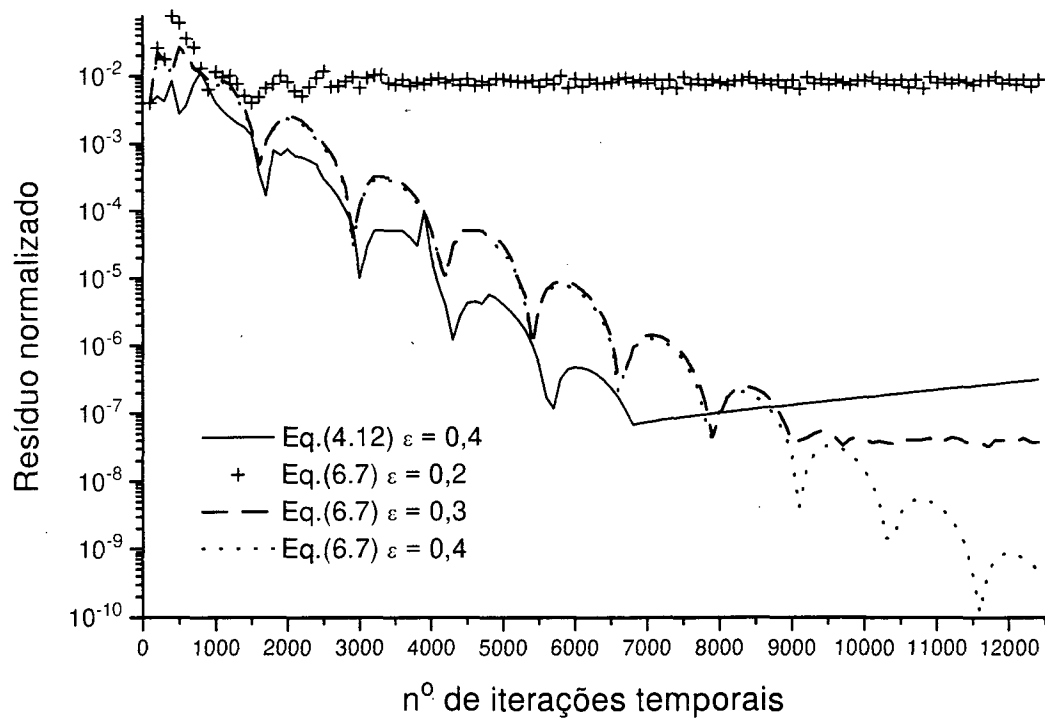


Figura 6.20 - Resíduo da quantidade de movimento linear para esquema TVD de fluxo modificado sequencial com velocidades caracteristicas uniformizada e não-uniformizada no bocal divergente.

Outro problema usado para testar os esquemas nessa nova abordagem é o escoamento num bocal convergente-divergente com entrada e saída subsônica. Na região convergente do bocal o fluido se acelera atingindo $M = 1$ na garganta. A partir daí, para um bocal divergente, o fluido aceleraria até o regime supersônico na saída. Para que o fluido desacelere na região divergente é preciso mude para o regime de escoamento subsônico. Apenas três condições de contorno físicas são necessárias para esse problema (Hirsch, 1988, Cap.19): densidade e velocidade prescritas na entrada e prescrita pressão na saída. A seção transversal para esse bocal na Eq.(6.1) varia de acordo com a função,

$$A(x) = \begin{cases} 1,0 + 1,5\left(1,0 - \frac{x}{5}\right)^2 & x \leq 5 \\ 1,0 + 0,5\left(1,0 - \frac{x}{5}\right)^2 & 5 \leq x \leq 10 \end{cases} \quad 0 \leq x \leq 10 \quad (6.8)$$

As condições de contorno são definidas na tabela 6.3 para que o choque ocorra na posição $x = 7,0m$. Essas condições correspondem a uma pressão de estagnação antes do choque, $P_0 = 101,3kPa$ e temperatura de estagnação, $T_0 = 300K$. O domínio físico é dividido em 100 volumes de controle elementares.

Os esquemas simultâneos não são apresentados. Testes numéricos feitos com condições de contorno de “zero”, primeira e segunda ordem explícitas não funcionaram adequadamente. Acredita-se que esse problema está associado ao tratamento da condição de contorno e com esquema explícito utilizado. A diferença desse escoamento com o do bocal divergente está na entrada subsônica e a passagem por um ponto sônico, onde o menor autovalor ($u - c$) muda de sinal. Harten (1983) obteve soluções para esse problema de duas formas: usando o TVD como pós-processador de uma solução obtida por um outro método e um esquema implícito modificado na forma “delta” (Eq. 4.2) para incorporar termos de alta resolução. Os esquemas sequenciais no entanto não apresentaram esse problema.

Tabela 6.3 - Condições de contorno para bocal convergente-divergente.

	Entrada	Saída
Densidade (Kg/m ³)	1,14345	1,03939
Velocidade (m/s)	82,69	151,62
Pressão (Pa)	97334,01	86078,46
Temperatura (K)	296,60	288,56
Energia Total (W)	247244,61	227143,29

Na figura 6.21 são apresentados os perfis de temperatura ao longo do bocal para os dois esquemas TVD de fluxo modificado sequenciais. Tanto o esquema com velocidade de propagação uniformizada e o não-uniformizado apresentaram resultados com mesma resolução. A posição do choque foi captada corretamente, mas a intensidade do salto foi atenuada.

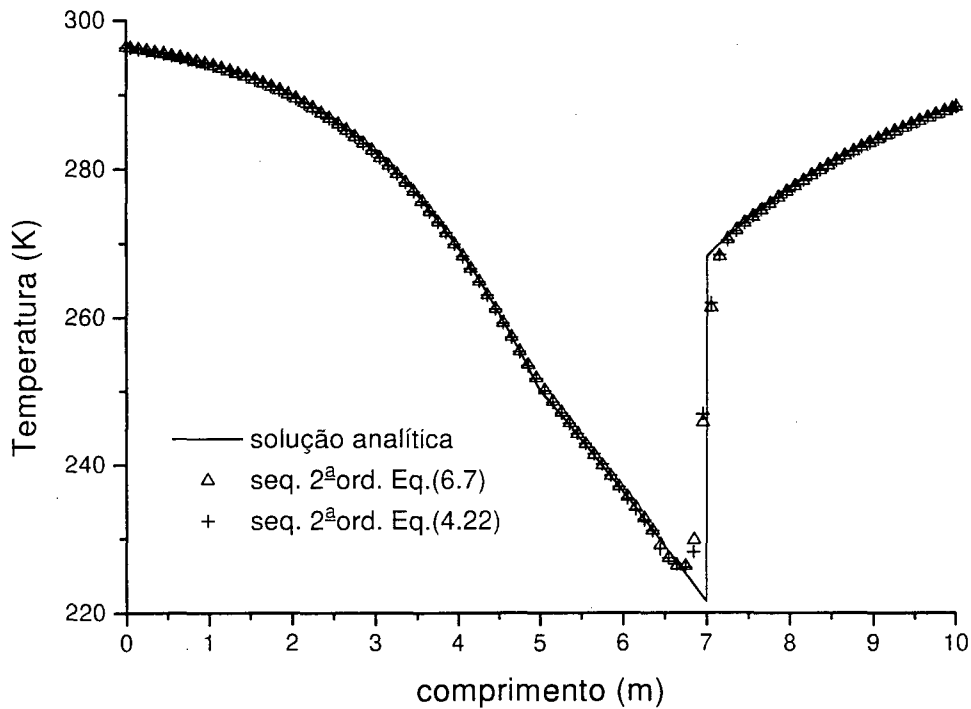


Figura 6.21 - Perfil de temperatura no bocal convergente-divergente para esquema TVD de fluxo modificado seqüencial. CFL = 0,4 e $\epsilon = 0,4$.

Na figura 6.22 é apresentado o comportamento do resíduo da quantidade de movimento linear para alguns valores de ϵ obtidos para o bocal convergente-divergente para CFL = 0,4. Observou-se que o esquema com velocidades características uniformizadas não convergem para valores de $\epsilon < 0,3$. Fazendo $\epsilon \geq 0,3$ o resíduo converge indefinidamente até precisão de máquina. Para $\epsilon = 0,8$ a tendência de convergência do resíduo se mantém, porém com uma taxa ligeiramente menor. O esquema com velocidades características não-uniformes mantém o mesmo comportamento do bocal divergente. Para $\epsilon = 0,3$ o resíduo oscila em torno de 10^{-6} a partir de 8.000 iterações. Para $\epsilon \geq 0,4$ a taxa de convergência não muda como no anterior. O erro de massa nesse problema para os dois esquemas ficou abaixo de 3,0%, e a região é estreita como no bocal divergente (figura 6.17). O perfil de entropia para os dois esquemas seqüenciais oscila na vizinhança do choque.

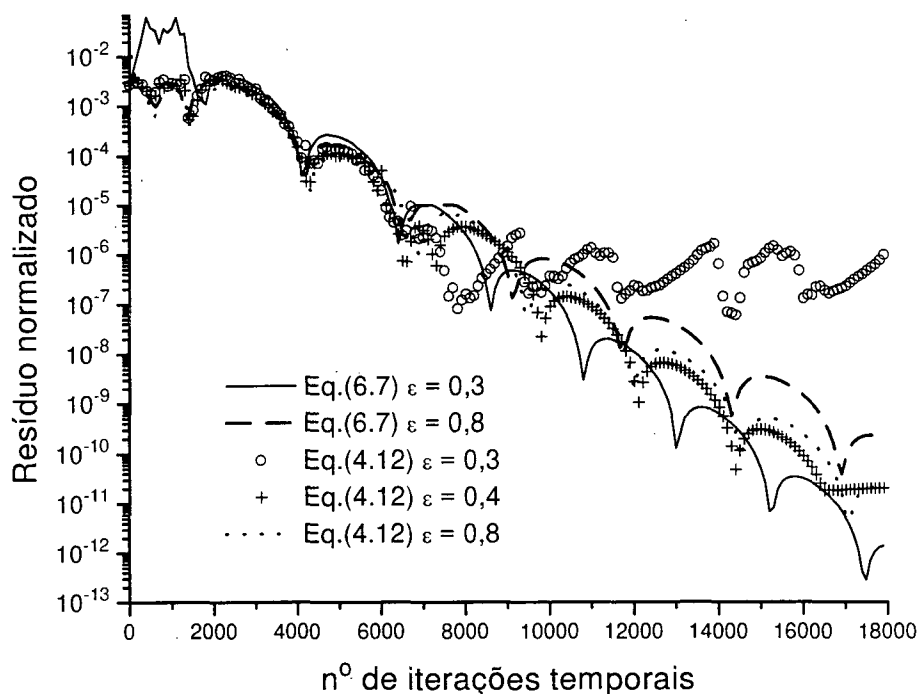


Figura 6.22 - Resíduo da quantidade de movimento linear para esquema TVD de fluxo modificado seqüencial com velocidades características uniformizada e não-uniformizada no bocal convergente-divergente.

Um último problema para testar os esquemas seqüenciais é o tubo de choque, caso 1 (tabela 6.1). Ao aplicar esses mesmos esquemas para o caso 2, validando-o com o trabalho de Thakur e Shyy (1993) esperava-se que eles não apresentassem um comportamento muito diferente do caso 1. Os resultados não confirmaram essa expectativa. Nas figuras 6.23 e 6.24 é apresentado o comportamento dos perfis adimensionais de temperatura variando-se o CFL ou ε separadamente para o esquema seqüencial de velocidades características não-uniformizadas. Nas figuras 6.25 e 6.26 o mesmo é feito para o esquema seqüencial de velocidades características uniformizadas. Nas soluções obtidas as descontinuidades estão na posição correta mas oscilações surgem nos patamares.

No esquema de velocidades não-uniformizadas (figuras 6.23 e 6.24) as oscilações ocorrem principalmente na região entre a rarefação e a descontinuidade de contato, e em menor ordem no choque, enquanto o segundo (figuras 6.25 e 6.26) oscila principalmente no choque e permanece estável entre a rarefação e a descontinuidade de contato. Nos experimentos numéricos realizados não se conseguiu obter um perfil monotônico para o caso 1 em ambos esquemas com 100 volumes de controle.

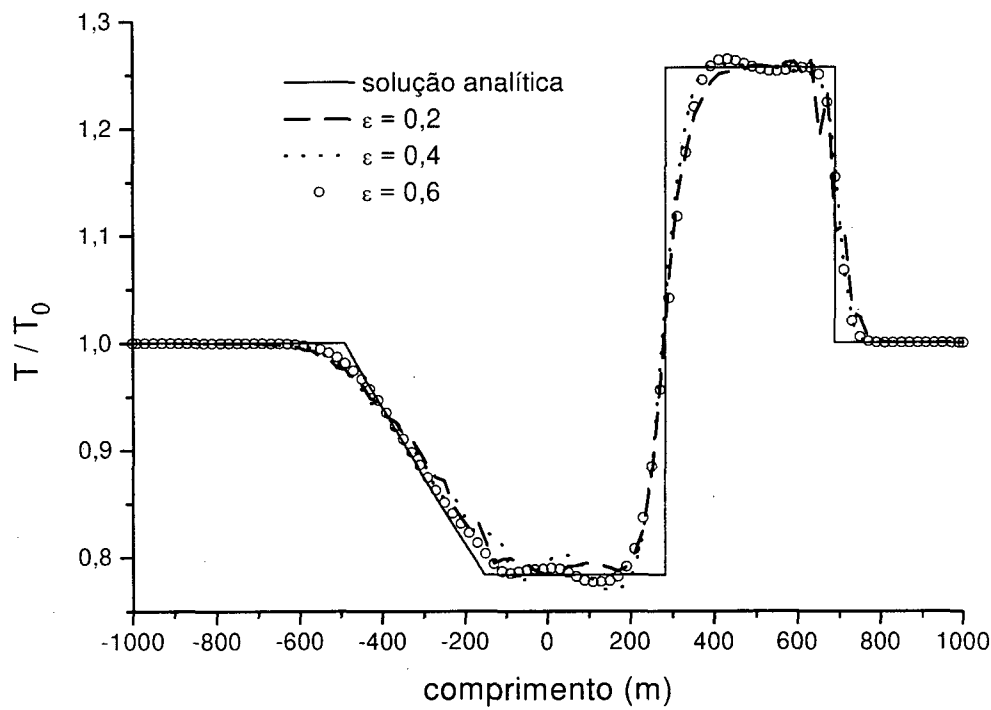


Figura 6.23 - Sensibilidade do esquema sequencial de velocidades características não-uniformizadas ao parâmetro de correção de entropia ϵ , para o tubo de choque, CFL = 0,4 (caso 1).

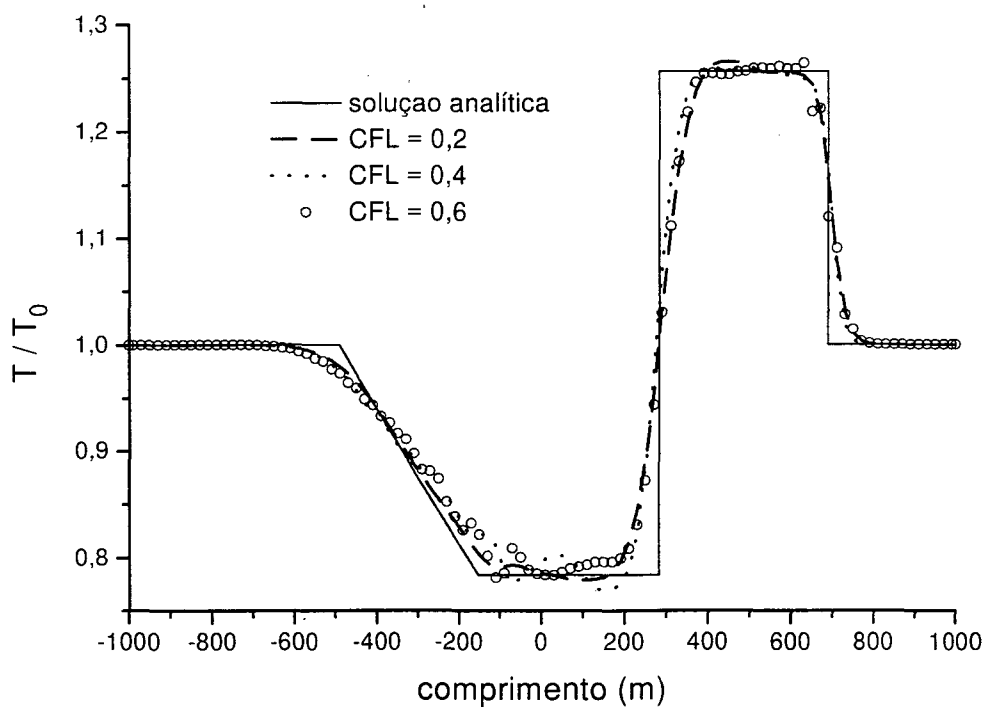


Figura 6.24 - Sensibilidade do esquema sequencial de velocidades características não-uniformizadas ao CFL para o tubo de choque, $\epsilon = 0,4$ (caso 1).

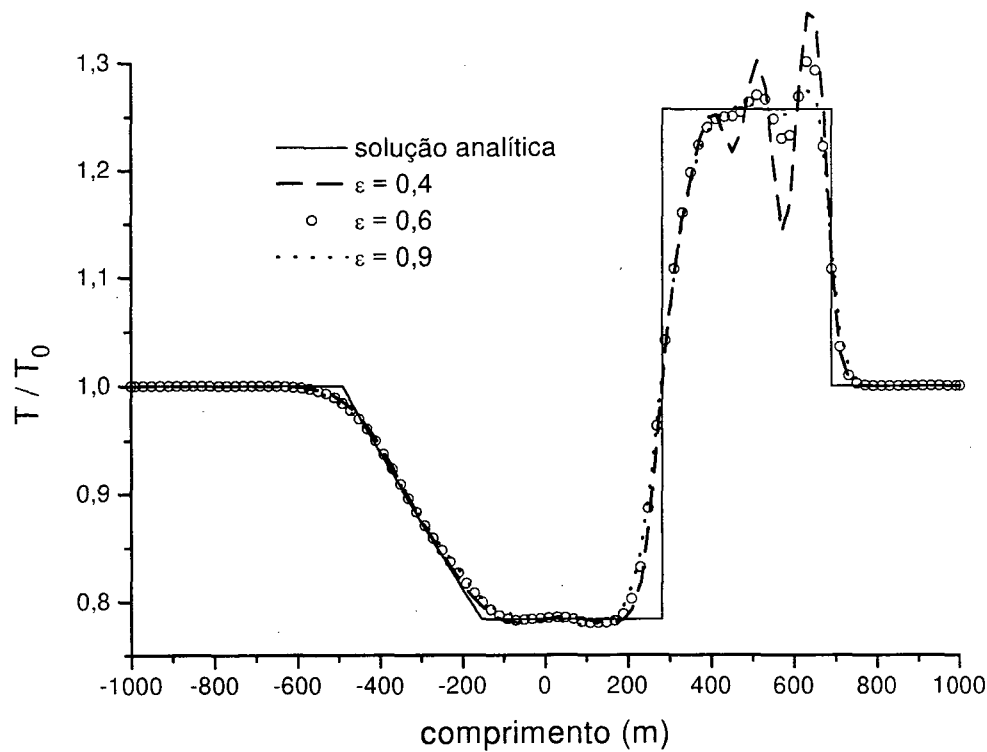


Figura 6.25 - Sensibilidade do esquema sequencial de velocidades características uniformizadas ao parâmetro de correção de entropia ε , para o tubo de choque, CFL = 0,4 (caso 1).

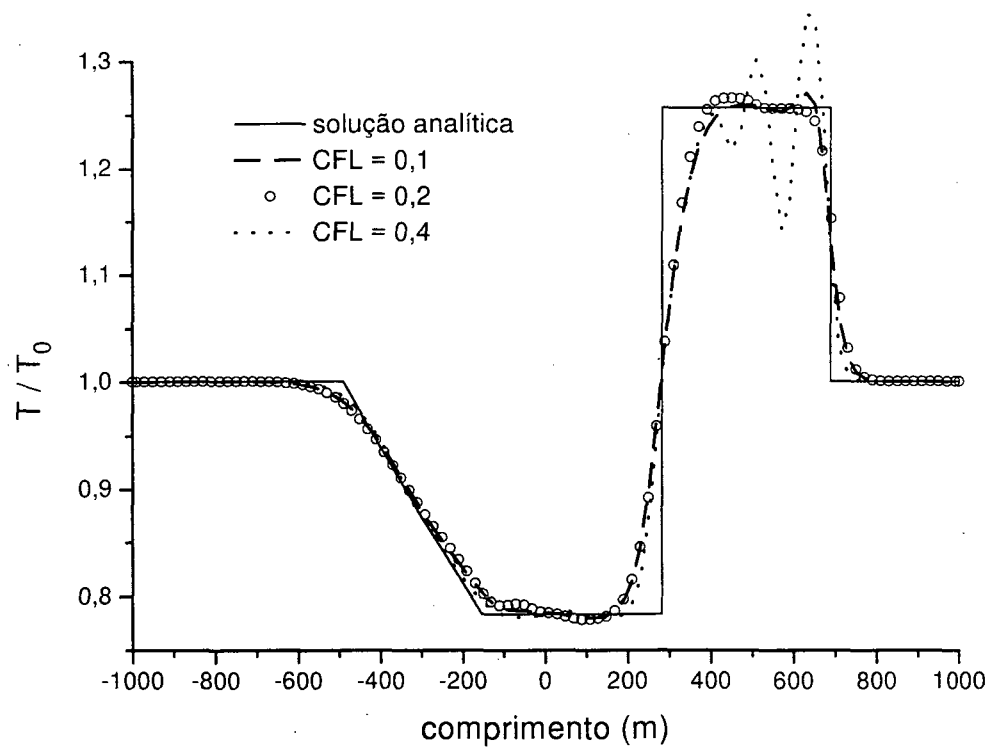


Figura 6.26 - Sensibilidade do esquema sequencial de velocidades características uniformizadas ao CFL para o tubo de choque, $\varepsilon = 0,4$ (caso 1).

Para entender esse comportamento inesperado deve-se observar que os esquemas de alta resolução TVD foram desenvolvidos para equações hiperbólicas escalares não-lineares e não para sistemas de equações. Escrevendo o sistema na forma da Eq.(4.62) é possível estender o TVD para sistemas de equações não-lineares. As aproximações do problema de Riemann (Roe, 1981a) são feitas de forma clara e suas conseqüências são previstas. Os autovalores representam a velocidade de propagação de perturbações nos campos das variáveis características ao longo do eixo x .

Na solução seqüencial do sistema de equações aplica-se o esquema TVD diretamente nas variáveis físicas. As velocidades características definidas pela Eq.(4.12) para cada equação escalar não podem ser interpretadas como sendo as velocidades de propagação de uma perturbação no campo dessa variável uma vez que ela não está desacoplada das outras variáveis do sistema. Os experimentos numéricos demonstraram que essa velocidade não é a apropriada para a determinação da condição CFL. A abordagem de velocidades uniformizadas introduz termos fontes que não são considerados na dedução dos critérios TVD (Eq. 4.6). Sabe-se que na presença de termos fontes “fortes” (*stiff*) as propriedades TVD não são garantidas (LeVeque e Yee, 1990). Uma das conseqüências desse progressivo afastamento do esquema original é o surgimento de dependências de parâmetros antes não percebidos, como o CFL e ϵ . Essa dependência pode ser explicada pela necessidade de maior dissipação artificial que o esquema seqüencial exige para compensar as não-linearidades provenientes do desacoplamento nas equações físicas.

A integração temporal do esquema seqüencial equívale ao método de Runge-Kutta de primeira ordem ou método de Euler. Esse método de integração é totalmente instável para uma discretização espacial por diferenças centrais. Na presença de dissipação artificial existe um Δt mínimo a partir do qual a solução converge. A velocidade característica Eq.(4.12) dos esquemas seqüenciais não parece ser adequada para a avaliação do coeficiente de dissipação artificial, bem como dos fluxos antidifusivos, \tilde{g} , responsáveis pela estabilidade do esquema, que também dependem desse parâmetro. O resultado é que quando se consegue eliminar as oscilações, as descontinuidades estão fortemente atenuadas.

6.3 Esquemas de Interpolação NVD - Cavidade Quadrada

Como problema teste para os esquemas de interpolação NVD, foi escolhido o escoamento forçado no interior de uma cavidade quadrada com uma das paredes deslizante e as demais paradas (figura 6.27). A velocidade da tampa superior, U , é calculada para simular um escoamento com $Re_L = 1000$ para as propriedades físicas do ar à temperatura de 300K (tabela 6.4) com malha 30x30.

Tabela 6.4 - Valores das variáveis para o problema da cavidade quadrada.

L (m)	H (m)	Δt (seg.)	μ ($\frac{N.s}{m^2}$)	ρ ($\frac{kg}{m^3}$)	U ($\frac{m}{s}$)	Re
1,0	1,0	0,1	$1,85 \times 10^{-5}$	1,18	$1,5678 \times 10^{-2}$	1.000

Uma das vantagens do esquema de interpolação NVD é a facilidade para implementar diferentes esquemas de interpolação a partir de uma pequena modificação no termo fonte. Para

verificar essa vantagem foram utilizados dois programas independentes. Um utiliza o arranjo desencontrado de variáveis e o outro o arranjo co-localizado. Em ambos programas se utiliza o SIMPLEC (Van Doormall e Raithby, 1984) para o tratamento do acoplamento pressão-velocidade.

O programa de arranjo co-localizado (Scola, 1995) utiliza o esquema de interpolação WUDS (Raithby e Torrance, 1974). Para implementar os diversos esquemas de interpolação NVD são fixados os coeficientes α em + 0,5 para $u > 0$ ou - 0,5 para $u < 0$ e β em 1,0 (Eqs. 3.68 e 3.69). Na ausência de correções no termo fonte esses valores de α e β tornam o esquema um *upwind* de primeira ordem (UDS). O programa de arranjo desencontrado (Deschamps, 1995) foi elaborado visando a implementação de esquemas NVD.

Inicialmente se fará uma comparação entre o perfil de velocidades, u , ao longo da linha média vertical da cavidade dos diferentes arranjos utilizados com o programa comercial FLUENT (1993) utilizando esquema de interpolação Power Law que será referenciado como PLAW. Nas comparações o programa de arranjo co-localizado será referenciado como COL (Scola, 1995) e o de arranjo desencontrado, referenciado como DES (Deschamps, 1995).

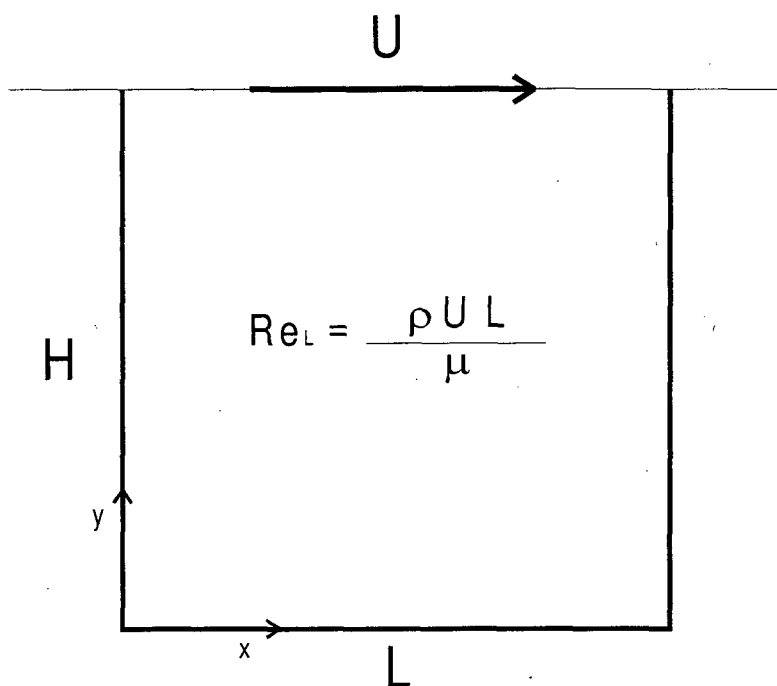


Figura 6.27 - Geometria da cavidade quadrada.

Na figura 6.28 são apresentados os perfis de velocidade, u , para os esquemas de interpolação UDS nos programas DES e COL, WUDS no COL, e PLAW no FLUENT. Como se pode observar os esquemas de interpolação híbridos (WUDS e Power Law) conseguem melhorar a resolução da solução em relação ao de primeira ordem (UDS). Apesar dessa melhora os resultados ainda não concordam com o resultado de Ghia *et al.* (1982). O valor mínimo da velocidade no perfil encontra-se bastante atenuada evidenciando o efeito da dissipação artificial nesses esquemas.

Existem dois caminhos a seguir para se conseguir melhorar a qualidade da solução: refinar a malha ou usar um esquema de interpolação de ordem mais alta. A primeira opção é a mais simples porém dificilmente é a escolhida. Para se chegar a resultados independentes de

malha em problemas mais gerais as exigências de memória e tempo de CPU a tornam proibitiva. Na segunda opção a facilidade de implementação e o aumento da resolução numérica são decisivos para a escolha de um esquema de alta ordem. A seguir algumas comparações são mostradas com o intuito de auxiliarem nesse tipo de escolha. As expressões dos diversos limitadores estão reunidas na tabela 5.2.

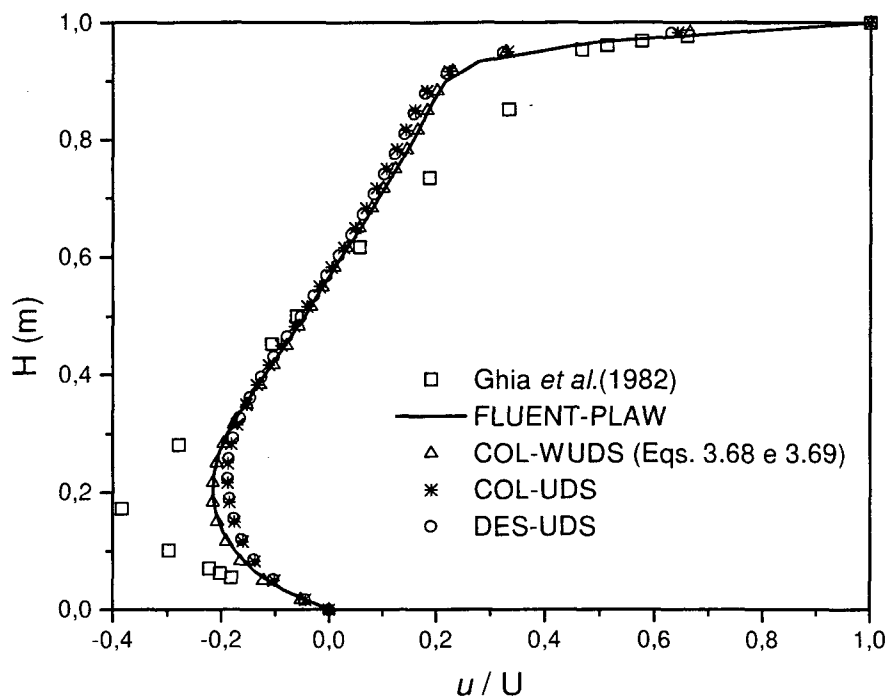


Figura 6.28 - Comparação dos esquemas de interpolação de baixa ordem para arranjo desencontrado e co-localizado com o FLUENT, $Re = 1000$.

Na figura 6.29 são apresentados os perfis de velocidade, u , para o esquema de interpolação UMIST (tabela 5.2) (Lien e Leschziner, 1994a), o QUICK-NVD (Eq. 5.9) e o SMART (Eq. 5.15) (Gaskell e Lau, 1988). Eles são comparados com as soluções do FLUENT (1993) e Ghia *et al.* (1982). Propositadamente os perfis foram escolhidos por serem muito semelhantes na sua definição. Todos derivam do QUICK (Leonard, 1979a) e as concordâncias entre si indicam que o valor de r se situa dentro da região CBC de segunda ordem, comum a todos, na maior parte do problema.

Em relação aos esquemas tradicionais, PLAW, WUDS e UDS, apresentados na figura 6.28 pode-se perceber a melhoria na qualidade das soluções numéricas introduzida pelos esquemas de interpolação NVD (figura 6.29). Sem ter sido necessário refinar a malha o perfil de velocidade ficou mais próximo dos resultados de Ghia *et al.* (1982). Os resultados entre o COL e DES são bastante próximos sem diferença visual, portanto, apenas o COL será apresentado nas próximas comparações. O critério de convergência utilizado foi $\Sigma P' \leq 10^{-8}$.

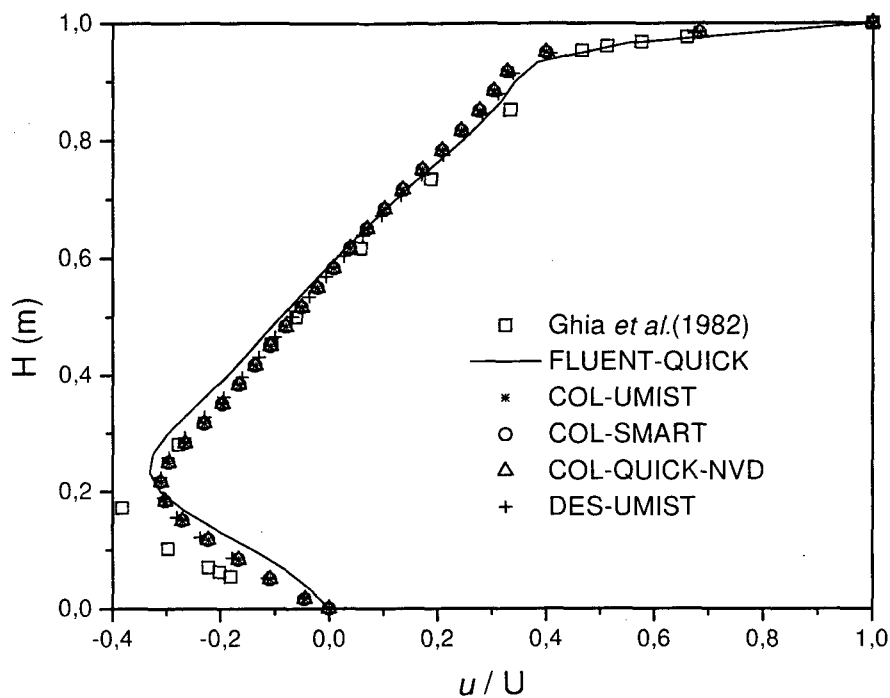


Figura 6.29 - Comparação dos esquemas de interpolação de alta ordem baseados no QUICK para arranjo desencontrado e co-localizado com o FLUENT-QUICK, $Re = 1000$.

Na Figura 6.30 são apresentados os perfis de velocidade, u , para os esquemas de interpolação da tabela 5.2 que apresentam funções contínuas: CLAM e EULER. O CLAM, ou limitador de Van Leer (1977b), já foi utilizado como função de interpolação em trabalhos de simulação de reservatórios de petróleo (Pinto, 1991; Mota, 1994; Mota e Maliska, 1994) no campo de permeabilidades relativas. O esquema de interpolação EULER (Eq. 5.29) estabilizou em $1 \times 10^{-8} \leq \Sigma P' \leq 2 \times 10^{-8}$. Todos os resultados são de alta ordem e não há diferença visível entre os perfis. Eles demonstram a mesma resolução que os esquemas da figura 6.29. A simplicidade das expressões, principalmente a do CLAM, por não envolver radiciação e possuir boa taxa de convergência, fazem desses esquemas bastante utilizados.

Na figura 6.31 compara-se os esquemas de interpolação OSHER, MUSCL, MINMOD e DIF. Central-NVD com os resultados do FLUENT (1993) para o esquema de interpolação *upwind* de segunda ordem que não convergiu para a malha 30×30 , mas mesmo assim apresentada. O esquema de interpolação DIF. Central-NVD corresponde a função $\phi(r) = 1$ para $r \geq 1$. Pelos resultados apresentados na figura 6.31 supõe-se que são técnicas diferentes. Os esquemas de interpolação OSHER foi o que apresentou o perfil mais externo de todos os esquemas de interpolação testados no presente trabalho, seguido de perto pelo MINMOD.

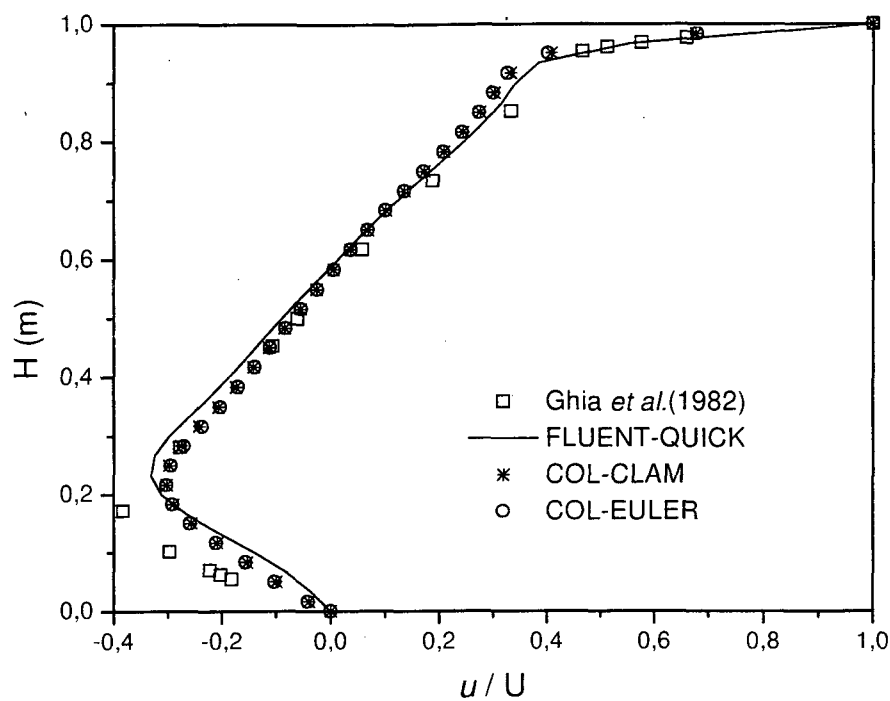


Figura 6.30 - Comparação dos esquemas de interpolação de alta ordem CLAM e EULER com o FLUENT-QUICK, $Re = 1000$.

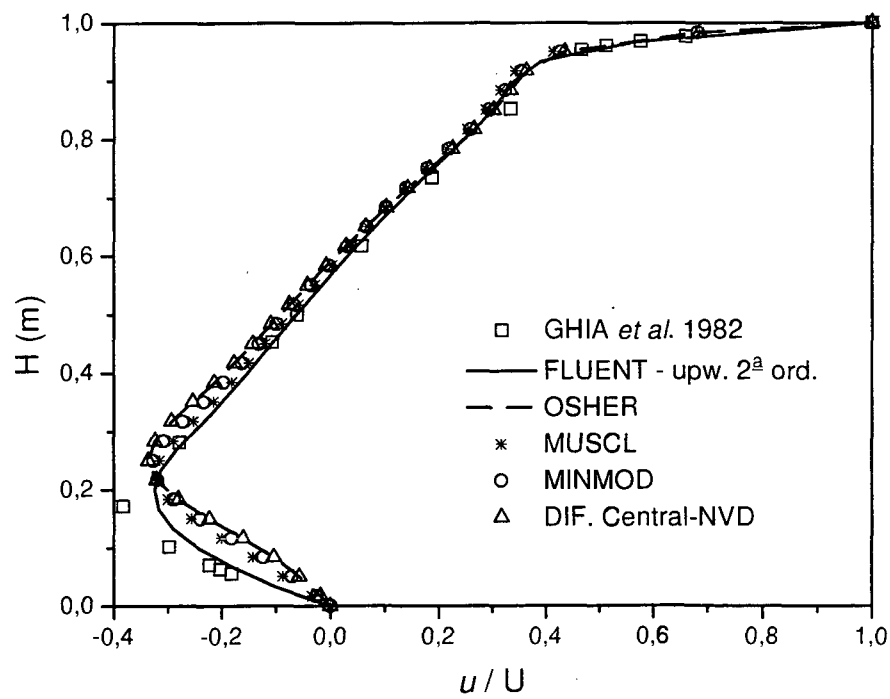


Figura 6.31 - Comparação dos esquemas de interpolação de alta ordem OSHER, MUSCL e MINMOD e FLUENT upw. 2ª ordem, $Re = 1000$.

Na figura 6.32 apresenta-se os resultados dos esquema de interpolação CLAM e FLUENT-QUICK para uma malha 60x60. Pode-se observar que as soluções numéricas, antes distintas para malha 30x30 (figura 6.29), convergem para a mesma solução com o refino de malha. Também na figura 6.32 foi feita uma comparação de malhas para soluções numéricas semelhantes. Os esquemas de interpolação PLAW e WUDS com malhas 60x60 foram equivalentes aos esquemas de interpolação QUICK-NVD e CLAM em malhas 30x30.

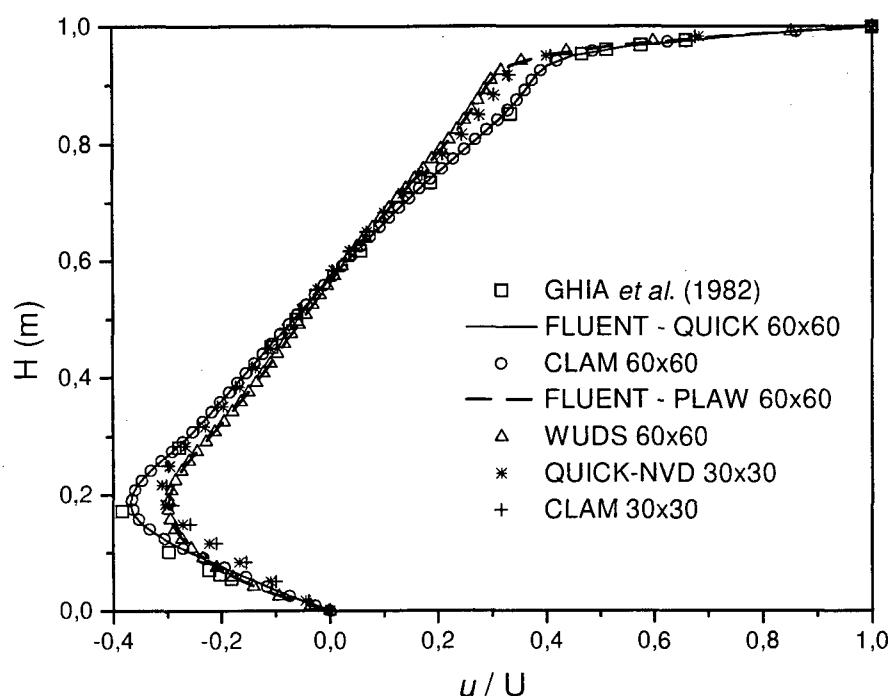


Figura 6.32 - Melhoria da solução numérica e a diminuição de malha para resultados semelhantes usando esquemas de interpolação NVD.

Por envolver termos não-lineares, que são acrescentados nos termos fontes dos esquemas tradicionais, sabe-se de antemão que os esquemas de interpolação NVD consumirão mais tempo de CPU numa comparação com malhas fixas. As vantagens sobre os esquemas tradicionais ficam claras quando se compara soluções semelhantes, variando-se a malha. Nessa situação a redução de malha permitida pelos esquemas de interpolação NVD permitiu uma redução sensível no tempo de CPU consumido. Na tabela 6.5 são apresentados os tempos de CPU dos diversos esquemas de interpolação NVD para malha 30x30 adimensionalizados pelo tempo do esquema WUDS para essa mesma malha. O passo de tempo adotado em todos os casos rodados foi $\Delta t = 0,1$ seg. e o critério de convergência $\Sigma P' \leq 10^{-8}$. Deve-se ter em mente que as soluções numéricas dos esquemas de interpolação NVD em malha 30x30 equivalem às soluções numéricas do WUDS ou PLAW em malhas 60x60.

Tabela 6.5 - Comparação do tempo de CPU entre os diversos esquemas de interpolação em malha 30x30.

Esquema de Interpolação	Tempo CPU	Nº iterações
UDS	0,924	481
WUDS	1,000	525
WUDS (60x60)	6,372	756
QUICK-NVD	1,606	906
SMART	1,632	906
UMIST	1,619	906
CLAM	1,565	851
CLAM (60x60)	7,295	923
EULER ($\Sigma P' \leq 2 \times 10^{-8}$)	3,145	2.013
OSHER	1,647	852
MUSCL	1,626	876
MINMOD	1,643	842

Testes numéricos conduzidos em malhas 30x30 até $Re = 3200$, não apresentaram oscilações mesmo usando-se diferença central pura. Antes de adotar a malha 30x30 testes com malha 60x60 apresentaram o mesmo comportamento qualitativo entre os esquemas. Os resultados para o esquema de interpolação CLAM foram incluídos na figura 6.32 e tabela 6.5. Ao trabalhar com a malha mais grosseira esperava-se uma diferenciação maior entre os esquemas, o que não foi confirmado. Isso se deve em parte a similaridade entre os esquemas de interpolação. Para a mudança dos esquemas de interpolação bastou a troca de uma única linha no programa.

7 CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES

7.1 Conclusões

Este trabalho teve como objetivo principal fazer um estudo de métodos de alta resolução, particularmente o TVD e os esquemas de interpolação NVD em algoritmos de solução simultânea e seqüencial. Um procedimento de extensão dos esquemas TVD para algoritmos seqüenciais é testado em problemas quase-unidimensionais transientes e em regime permanente. Outro objetivo desse trabalho foi o de entender e implementar os esquemas de interpolação NVD em programas já existentes. Este esforço contribui para que analistas numéricos envolvidos com volumes finitos familiarizem-se e empreguem esquemas de alta resolução em seus códigos computacionais. As conclusões principais são listadas abaixo.

1) Não se consegue esquemas de alta resolução sem termos não-lineares. É um preço a se pagar pela melhoria do esquema.

2) Os esquemas TVD de solução simultânea conseguem conciliar alta resolução com monotonicidade.

3) Os esquemas TVD de solução seqüencial não devem ser aplicados sem que antes haja uma abordagem mais consistente para o desacoplamento das leis de conservação.

4) Os esquemas de alta resolução devem ser usados quando houver necessidade de captura de descontinuidades. Para problemas difusivos não há necessidade de se conviver com esquemas de baixa ordem uma vez que quando esses são indicados ($Re \ll 1$) já ter-se-ia alcançado os limites para aplicação de um esquema de segunda ordem ($Re < 2$).

5) A forma do esquema de interpolação NVD é altamente recomendável por permitir testar inúmeros esquemas com apenas pequenas mudanças na expressão do termo fonte. Esse esquema está limitado a uma base de três pontos, portanto esquemas de interpolação de mais alta ordem não podem usá-lo. Aumento do tempo de CPU requerido por iteração é mais do que compensado pela diminuição da malha.

7.2 Recomendações

Como recomendação para trabalhos futuros sugere-se:

- Aplicar os esquemas de alta resolução de solução simultânea para problemas bidimensionais em malhas generalizadas na solução de escoamentos compressíveis usando formulação explícita e implícita.

- Aplicação dos esquemas de alta resolução nos fluxos ou esquemas de interpolação NVD nas variáveis conservadas em problemas de petróleo e plásticos para captura de frentes.
- Estender os esquemas TVD para malhas não estruturadas e adaptativas.
- Implementar esquemas de alta resolução de ordem maior que dois, como o UNO e ENO e PPM.
- Testar o esquema de interpolação NVD nos esquemas numéricos que resolvem escoamentos em qualquer regime de velocidade.
- Testar o NVD em problemas transientes, altos números de Re e malhas não-ortogonais.
- Implementação dos esquemas de alta resolução para solução da equação de Navier-Stokes e testar diferentes modelos de turbulência.
- Verificar a influência de diferentes esquemas de alta resolução sobre modelos de turbulência.

Apêndice A - Soluções Numéricas

Afim de permitir análises em separado e posteriores comparações com os resultados obtidos no presente trabalho, são apresentadas as listagens das soluções numéricas dos perfis adimensionais de temperatura para o problema do tubo de choque, caso 1 (tabela 6.1), dos esquemas TVD e tradicionais, e perfis adimensionais da velocidade u , dos esquemas NVD, ao longo da linha média vertical da cavidade quadrada (figura 6.27, tabela 6.4).

Tabela A.1 - Soluções numéricas dos esquemas tradicionais testados no tubo de choque.

X (sol. analítica)	solução analítica	X (sol. numérica)	Lax-Wendroff	Roe	Lax-Friedrichs	QUICK	UDS
1.000,00000	1,00000	-1.000	1,00000	1,00000	1,00000	0,99999	1,00000
688,58093	1,00000	-990	1,00000	1,00000	1,00000	1,00001	1,00000
688,58093	1,25625	-970	1,00000	1,00000	1,00000	1,00001	1,00000
282,05798	1,25625	-950	1,00000	1,00000	1,00000	1,00001	1,00000
282,05798	0,78342	-930	1,00000	1,00000	1,00000	1,00001	1,00000
-152,52939	0,78342	-910	1,00000	1,00000	1,00000	1,00001	1,00000
-155,91408	0,78545	-890	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000
-159,29877	0,78749	-870	1,00000	1,00000	1,00000	1,00001	1,00000
-162,68346	0,78953	-850	1,00000	1,00000	1,00000	1,00001	1,00000
-166,06815	0,79157	-830	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000
-169,45284	0,79362	-810	1,00000	1,00000	0,99997	1,00000	1,00000
-172,83752	0,79567	-790	1,00000	1,00000	0,99997	1,00000	1,00000
-176,22221	0,79772	-770	1,00000	1,00000	0,99981	1,00000	1,00000
-179,60690	0,79977	-750	1,00000	1,00000	0,99979	0,99999	1,00000
-182,99159	0,80183	-730	1,00000	1,00000	0,99924	0,99999	1,00000
-186,37628	0,80389	-710	1,00000	0,99999	0,99918	0,99999	1,00000
-189,76097	0,80595	-690	1,00000	0,99996	0,99773	0,99999	1,00000
-193,14566	0,80801	-670	1,00000	0,99988	0,99759	0,99998	0,99999
-196,53035	0,81008	-650	0,99999	0,99967	0,99464	0,99994	0,99997
-199,91504	0,81215	-630	0,99997	0,99923	0,99435	0,99984	0,99991
-203,29973	0,81422	-610	0,99991	0,99838	0,98940	0,99960	0,99974
-206,68442	0,81630	-590	0,99972	0,99692	0,98889	0,99902	0,99934
-210,06911	0,81837	-570	0,99925	0,99463	0,98175	0,99780	0,99848
-213,45380	0,82045	-550	0,99819	0,99136	0,98099	0,99546	0,99679
-216,83849	0,82254	-530	0,99616	0,98702	0,97177	0,99154	0,99382
-220,22318	0,82462	-510	0,99270	0,98162	0,97074	0,98574	0,98917
-223,60786	0,82671	-490	0,98749	0,97522	0,95980	0,97811	0,98262
-226,99255	0,82880	-470	0,98043	0,96793	0,95850	0,96903	0,97424
-230,37724	0,83089	-450	0,97164	0,95989	0,94629	0,95898	0,96433

Tabela A.1 - continuação

-233,76193	0,83299	-430	0,96145	0,95123	0,94473	0,94841	0,95333
-237,14662	0,83509	-410	0,95022	0,94207	0,93170	0,93761	0,94164
-240,53131	0,83719	-390	0,93828	0,93251	0,92989	0,92676	0,92959
-243,91600	0,83929	-370	0,92590	0,92265	0,91647	0,91594	0,91746
-247,30069	0,84140	-350	0,91325	0,91256	0,91442	0,90522	0,90545
-250,68538	0,84351	-330	0,90047	0,90231	0,90096	0,89463	0,89372
-254,07007	0,84562	-310	0,88762	0,89197	0,89870	0,88419	0,88235
-257,45477	0,84773	-290	0,87475	0,88158	0,88553	0,87392	0,87139
-260,83948	0,84985	-270	0,86189	0,87119	0,88308	0,86385	0,86082
-264,22418	0,85197	-250	0,84907	0,86086	0,87048	0,85402	0,85064
-267,60889	0,85409	-230	0,83630	0,85065	0,86790	0,84447	0,84087
-270,99359	0,85622	-210	0,82360	0,84064	0,85614	0,83523	0,83153
-274,37830	0,85835	-190	0,81100	0,83092	0,85347	0,82641	0,82269
-277,76300	0,86048	-170	0,79857	0,82163	0,84281	0,81805	0,81442
-281,14771	0,86261	-150	0,78643	0,81295	0,84016	0,81028	0,80683
-284,53241	0,86474	-130	0,77500	0,80511	0,83084	0,80322	0,80001
-287,91711	0,86688	-110	0,76566	0,79842	0,82830	0,79701	0,79412
-291,30182	0,86902	-90	0,76302	0,79318	0,82053	0,79185	0,78931
-294,68652	0,87117	-70	0,77445	0,78960	0,81825	0,78788	0,78563
-298,07123	0,87331	-50	0,79085	0,78761	0,81217	0,78520	0,78306
-301,45593	0,87546	-30	0,79034	0,78686	0,81029	0,78387	0,78163
-304,84064	0,87761	-10	0,77740	0,78684	0,80593	0,78378	0,78120
-308,22534	0,87977	10	0,77929	0,78712	0,80461	0,78471	0,78141
-311,61005	0,88192	30	0,78847	0,78750	0,80189	0,78632	0,78184
-314,99475	0,88408	50	0,78295	0,78794	0,80127	0,78826	0,78239
-318,37946	0,88624	70	0,78098	0,78844	0,80004	0,79027	0,78343
-321,76416	0,88841	90	0,78662	0,78907	0,80025	0,79236	0,78512
-325,14886	0,89058	110	0,78234	0,78996	0,80042	0,79499	0,78627
-328,53357	0,89275	130	0,78559	0,79141	0,80197	0,79908	0,78495
-331,91827	0,89492	150	0,78637	0,79420	0,80472	0,80597	0,78127
-335,30298	0,89709	170	0,79119	0,79974	0,81083	0,81726	0,77905
-338,68768	0,89927	190	0,80036	0,81019	0,82183	0,83473	0,78450
-342,07239	0,90145	210	0,81719	0,82820	0,84088	0,86007	0,80348
-345,45709	0,90363	230	0,84415	0,85628	0,86976	0,89466	0,83923
-348,84180	0,90582	250	0,88292	0,89598	0,91042	0,93933	0,89127
-352,22650	0,90801	270	0,93330	0,94701	0,96164	0,99409	0,95521
-355,61121	0,91020	290	0,99260	1,00648	1,02104	1,05791	1,02360
-358,99591	0,91239	310	1,05552	1,06893	1,08233	1,12750	1,08821
-362,38062	0,91459	330	1,11521	1,12744	1,13960	1,19130	1,14251
-365,76532	0,91679	350	1,16551	1,17594	1,18617	1,23795	1,18347
-369,15002	0,91899	370	1,20307	1,21135	1,22020	1,26456	1,21152
-372,53473	0,92119	390	1,22794	1,23405	1,24122	1,27577	1,22909
-375,91943	0,92340	410	1,24259	1,24684	1,25307	1,27860	1,23927
-379,30414	0,92561	430	1,25032	1,25312	1,25802	1,27836	1,24475
-382,68884	0,92782	450	1,25398	1,25573	1,26003	1,27770	1,24749
-386,07355	0,93004	470	1,25553	1,25657	1,25980	1,27727	1,24877
-389,45825	0,93225	490	1,25604	1,25668	1,25958	1,27711	1,24934
-392,84296	0,93447	510	1,25610	1,25656	1,25860	1,27726	1,24954
-396,22766	0,93670	530	1,25601	1,25640	1,25835	1,27778	1,24946
-399,61237	0,93892	550	1,25597	1,25627	1,25726	1,27872	1,24904

-402,99707	0,94115	570	1,25632	1,25617	1,25738	1,28013	1,24855
-406,38177	0,94338	590	1,25664	1,25610	1,25365	1,28203	1,24915
-409,76648	0,94561	610	1,25488	1,25604	1,25573	1,28431	1,25257
-413,15118	0,94785	630	1,25607	1,25585	1,23268	1,28645	1,25693
-416,53589	0,95009	650	1,28024	1,25359	1,24466	1,28672	1,24880
-419,92059	0,95233	670	1,27092	1,23277	1,15917	1,28152	1,20333
-423,30530	0,95457	690	1,08780	1,14854	1,19354	1,26383	1,11599
-426,69000	0,95682	710	1,00414	1,03682	1,05329	1,22259	1,03837
-430,07471	0,95907	730	1,00014	1,00410	1,08697	1,15045	1,00760
-433,45941	0,96132	750	1,00000	1,00038	1,00797	1,06431	1,00114
-436,84412	0,96357	770	1,00000	1,00003	1,01690	1,01470	1,00015
-440,22882	0,96583	790	1,00000	1,00000	1,00077	1,00213	1,00002
-443,61353	0,96809	810	1,00000	1,00000	1,00182	1,00025	1,00000
-446,99823	0,97035	830	1,00000	1,00000	1,00004	1,00003	1,00000
-450,38293	0,97262	850	1,00000	1,00000	1,00010	1,00000	1,00000
-453,76764	0,97488	870	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000
-457,15234	0,97715	890	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000
-460,53705	0,97943	910	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000
-463,92175	0,98170	930	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000
-467,30646	0,98398	950	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000
-470,69116	0,98626	970	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000
-474,07587	0,98854	990	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000
-477,46057	0,99083	1.000	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000
-480,84528	0,99312						
-484,22998	0,99541						
-487,61469	0,99770						
-490,99899	1,00000						
-1.000,00000	1,00000						

Harten Eq.(4.23)	Harten Eq.(4.28)	Harten Eq.(4.29)	Minmod Eq.(4.45)	VanLeer Eq.(4.43)	Chak.-Osher Eq.(4.44)	Superbee Eq.(4.42)	Davis Eq.(4.55)	Davis Eq.(4.56)
1,00000	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000
1,00000	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000
1,00000	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000
1,00000	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000
1,00000	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000
1,00000	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000
1,00000	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000
1,00000	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000
1,00000	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000
1,00000	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000
1,00000	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000
1,00000	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000
1,00000	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000
1,00000	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000
1,00000	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000
1,00000	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000
1,00000	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000	0,99999	0,99999

Tabela A.2 - continuação

1,00000	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000	0,99996	0,99996
0,99999	0,99999	1,00000	0,99999	1,00000	1,00000	1,00000	0,99988	0,99989
0,99997	0,99997	1,00000	0,99997	1,00000	1,00000	1,00000	0,99970	0,99972
0,99990	0,99990	1,00000	0,99990	0,99999	1,00000	1,00000	0,99931	0,99936
0,99970	0,99970	1,00000	0,99970	0,99997	1,00000	1,00000	0,99857	0,99866
0,99918	0,99919	0,99999	0,99917	0,99984	0,99998	0,99999	0,99727	0,99742
0,99802	0,99804	0,99994	0,99800	0,99935	0,99990	0,99992	0,99517	0,99540
0,99578	0,99583	0,99971	0,99575	0,99786	0,99948	0,99958	0,99204	0,99237
0,99202	0,99211	0,99868	0,99196	0,99445	0,99747	0,99796	0,98769	0,98812
0,98639	0,98654	0,99388	0,98629	0,98842	0,98924	0,99101	0,98201	0,98256
0,97881	0,97906	0,98279	0,97866	0,97983	0,97796	0,98034	0,97501	0,97565
0,96945	0,96982	0,97073	0,96920	0,96935	0,96626	0,96925	0,96677	0,96748
0,95858	0,95914	0,95843	0,95816	0,95772	0,95439	0,95768	0,95743	0,95817
0,94648	0,94735	0,94593	0,94558	0,94550	0,94229	0,94574	0,94717	0,94791
0,93332	0,93471	0,93328	0,93275	0,93298	0,93017	0,93348	0,93617	0,93687
0,92011	0,92138	0,92054	0,92007	0,92034	0,91806	0,92111	0,92458	0,92520
0,90724	0,90811	0,90776	0,90755	0,90769	0,90604	0,90856	0,91252	0,91304
0,89470	0,89513	0,89496	0,89520	0,89510	0,89407	0,89595	0,90004	0,90043
0,88246	0,88246	0,88218	0,88303	0,88260	0,88216	0,88330	0,88734	0,88740
0,87051	0,87010	0,86945	0,87106	0,87027	0,87037	0,87064	0,87472	0,87427
0,85886	0,85809	0,85680	0,85930	0,85813	0,85878	0,85806	0,86237	0,86148
0,84753	0,84644	0,84425	0,84780	0,84626	0,84742	0,84557	0,85036	0,84913
0,83656	0,83521	0,83188	0,83662	0,83472	0,83637	0,83322	0,83876	0,83730
0,82603	0,82452	0,81976	0,82587	0,82364	0,82567	0,82113	0,82767	0,82610
0,81608	0,81451	0,80811	0,81572	0,81317	0,81551	0,80947	0,81725	0,81568
0,80693	0,80545	0,79732	0,80643	0,80361	0,80619	0,79852	0,80775	0,80630
0,79890	0,79767	0,78848	0,79836	0,79541	0,79808	0,78901	0,79952	0,79828
0,79241	0,79152	0,78463	0,79192	0,78912	0,79159	0,78461	0,79291	0,79196
0,78776	0,78723	0,78314	0,78741	0,78517	0,78704	0,78297	0,78817	0,78755
0,78500	0,78474	0,78264	0,78478	0,78334	0,78442	0,78243	0,78528	0,78498
0,78375	0,78364	0,78255	0,78361	0,78283	0,78333	0,78234	0,78385	0,78383
0,78341	0,78334	0,78258	0,78330	0,78279	0,78309	0,78245	0,78335	0,78351
0,78344	0,78336	0,78285	0,78331	0,78301	0,78316	0,78283	0,78328	0,78355
0,78368	0,78356	0,78299	0,78350	0,78326	0,78336	0,78292	0,78336	0,78372
0,78391	0,78376	0,78299	0,78369	0,78336	0,78342	0,78283	0,78350	0,78398
0,78408	0,78392	0,78299	0,78388	0,78341	0,78345	0,78273	0,78370	0,78428
0,78425	0,78406	0,78299	0,78409	0,78348	0,78355	0,78268	0,78397	0,78453
0,78445	0,78422	0,78294	0,78433	0,78355	0,78374	0,78258	0,78430	0,78480
0,78470	0,78444	0,78277	0,78456	0,78364	0,78399	0,78230	0,78473	0,78515
0,78506	0,78474	0,78261	0,78482	0,78381	0,78430	0,78208	0,78526	0,78564
0,78555	0,78517	0,78260	0,78521	0,78415	0,78473	0,78215	0,78593	0,78631
0,78617	0,78572	0,78258	0,78586	0,78469	0,78535	0,78238	0,78685	0,78719
0,78701	0,78651	0,78228	0,78702	0,78524	0,78637	0,78286	0,78843	0,78851
0,78879	0,78827	0,78155	0,78944	0,78591	0,78858	0,78323	0,79198	0,79132
0,79392	0,79341	0,78155	0,79533	0,78785	0,79400	0,78402	0,80087	0,79880
0,80797	0,80747	0,78349	0,80988	0,79584	0,80712	0,78688	0,82245	0,81826
0,84135	0,84088	0,79746	0,84326	0,82439	0,83635	0,80153	0,87017	0,86387
0,91129	0,91089	0,87594	0,91258	0,90096	0,89560	0,87932	0,94869	0,94786
1,03318	1,03264	1,06448	1,03327	1,03905	1,00430	1,06440	1,03847	1,03717
1,14408	1,14320	1,23186	1,14340	1,17701	1,17217	1,23145	1,11731	1,11465

[illegible][illegible]

Tabela A.2 - continuação

1,00000	1,00000	1,00000	0,78620	0,77487	0,78322
1,00000	1,00000	1,00000	0,78806	0,78972	0,79274
1,00000	1,00000	1,00000	0,79844	0,82379	0,81719
1,00000	1,00000	1,00000	0,84750	0,88797	0,87108
1,00000	0,99999	1,00000	0,93887	0,98071	0,95351
1,00000	0,99998	0,99999	1,04678	1,07769	1,03639
1,00000	0,99995	0,99998	1,14198	1,15295	1,10397
0,99999	0,99989	0,99995	1,20055	1,20628	1,15489
0,99996	0,99970	0,99988	1,23162	1,23854	1,19282
0,99989	0,99941	0,99974	1,24645	1,25401	1,22685
0,99974	0,99859	0,99947	1,25286	1,25966	1,24892
0,99940	0,99748	0,99897	1,25534	1,25963	1,25099
0,99871	0,99515	0,99809	1,25616	1,25932	1,23333
0,99738	0,99108	0,99663	1,25637	1,25864	1,21683
0,99492	0,98685	0,99433	1,25635	1,25834	1,23429
0,99085	0,98220	0,99092	1,25623	1,25786	1,27748
0,98504	0,97299	0,98615	1,25614	1,25703	1,30094
0,97756	0,96848	0,97984	1,25610	1,25483	1,27643
0,96862	0,95648	0,97190	1,25609	1,25539	1,20320
0,95850	0,94448	0,96235	1,25612	1,25540	1,14177
0,94750	0,94039	0,95133	1,25620	1,25313	1,17011
0,93589	0,93288	0,93895	1,25628	1,25155	1,27798
0,92386	0,91664	0,92514	1,25631	1,24977	1,34476
0,91156	0,90517	0,91069	1,25677	1,24465	1,33930
0,89911	0,89887	0,89664	1,24646	1,22606	1,25298
0,88658	0,89526	0,88309	1,13853	1,16309	1,11228
0,87403	0,87943	0,87003	1,02291	1,06816	1,03146
0,86151	0,86354	0,85736	1,00196	1,01893	1,00706
0,84906	0,85483	0,84505	1,00016	1,00425	1,00153
0,83674	0,85759	0,83316	1,00001	1,00091	1,00034
0,82464	0,84636	0,82188	1,00000	1,00019	1,00007
0,81292	0,82755	0,81151	1,00000	1,00004	1,00002
0,80190	0,82303	0,80238	1,00000	1,00001	1,00000
0,79230	0,82177	0,79473	1,00000	1,00000	1,00000
0,78579	0,82142	0,78868	1,00000	1,00000	1,00000
0,78350	0,81159	0,78432	1,00000	1,00000	1,00000
0,78285	0,78787	0,78177	1,00000	1,00000	1,00000
0,78273	0,77459	0,78087	1,00000	1,00000	1,00000
0,78275	0,78156	0,78084	1,00000	1,00000	1,00000
0,78284	0,78822	0,78129	1,00000	1,00000	1,00000
0,78305	0,79017	0,78236	1,00000	1,00000	1,00000
0,78333	0,79937	0,78406	1,00000	1,00000	1,00000
0,78354	0,80126	0,78564	1,00000	1,00000	1,00000
0,78365	0,80174	0,78613			
0,78375	0,79809	0,78555			
0,78397	0,78972	0,78416			
0,78437	0,77826	0,78249			
0,78481	0,77035	0,78120			
0,78519	0,76979	0,78038			
0,78558	0,77043	0,78040			

Tabela A.3 - Soluções numéricas dos esquemas NVD testados na cavidade quadrada.

Y (Ghia)	Ghia <i>et al.</i> (1982)	Y (FLUENT)	FLUENT Power Law	FLUENT QUICK	Y (COL)	COL - WUDS	COL - UDS
0,05469	-0,18109	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000
0,06250	-0,20196	0,03333	-0,08321	-0,03498	0,01667	-0,05244	-0,04399
0,07031	-0,22220	0,06667	-0,13891	-0,08120	0,05000	-0,12243	-0,10258
0,10156	-0,29730	0,10000	-0,17422	-0,13998	0,08333	-0,16491	-0,13839
0,17188	-0,38289	0,13333	-0,19672	-0,20518	0,11667	-0,19115	-0,16076
0,28125	-0,27805	0,16667	-0,21013	-0,26599	0,15000	-0,20727	-0,17548
0,45313	-0,10648	0,20000	-0,21559	-0,31080	0,18333	-0,21530	-0,18473
0,50000	-0,06080	0,23333	-0,21351	-0,33088	0,21667	-0,21573	-0,18889
0,61719	0,05702	0,26667	-0,20434	-0,32431	0,25000	-0,20888	-0,18786
0,73438	0,18719	0,30000	-0,18895	-0,29722	0,28333	-0,19543	-0,18156
0,85156	0,33304	0,33333	-0,16862	-0,26017	0,31667	-0,17649	-0,17022
0,95313	0,46604	0,36667	-0,14502	-0,22208	0,35000	-0,15366	-0,15437
0,96094	0,51117	0,40000	-0,11991	-0,18671	0,38333	-0,12879	-0,13486
0,96875	0,57492	0,43333	-0,09478	-0,15373	0,41667	-0,10362	-0,11276
0,97656	0,65928	0,46667	-0,07046	-0,12151	0,45000	-0,07935	-0,08920
1,00000	1,00000	0,50000	-0,04705	-0,08895	0,48333	-0,05632	-0,06520
		0,53333	-0,02411	-0,05571	0,51667	-0,03414	-0,04140
		0,56667	-0,00113	-0,02177	0,55000	-0,01216	-0,01800
		0,60000	0,02218	0,01287	0,58333	0,01014	0,00493
		0,63333	0,04579	0,04835	0,61667	0,03297	0,02710
		0,66667	0,06944	0,08493	0,65000	0,05611	0,04847
		0,70000	0,09275	0,12297	0,68333	0,07919	0,06900
		0,73333	0,11535	0,16271	0,71667	0,10187	0,08868
		0,76667	0,13691	0,20384	0,75000	0,12382	0,10749
		0,80000	0,15716	0,24508	0,78333	0,14479	0,12544
		0,83333	0,17595	0,28388	0,81667	0,16455	0,14272
		0,86667	0,19370	0,31690	0,85000	0,18301	0,16031
		0,90000	0,21598	0,34255	0,88333	0,20118	0,18217
		0,93333	0,27700	0,38428	0,91667	0,22926	0,22287
		0,96667	0,49061	0,55399	0,95000	0,32756	0,33052
		1,00000	1,00000	1,00000	0,98333	0,66361	0,64057
					1,00000	1,00000	1,00000

[illegible]

Referências Bibliográficas

1. ALLEN, D.N and SOUTHWELL, R.V., "*Relaxation methods applied to determine the motion, in two dimensions, of a viscous fluid past a fixed cylinder*", Quaterly J. of Mechanics and Applied Mathematics, vol. 8, pp. 129-145, 1955.
2. ANDERSON, D.A., TANNEHILL, J.C. and PLETCHER, R.H., "*Computational Fluid Mechanics and Heat Transfer*", Washington, Hemisphere Publishing Company, 1984.
3. ANDERSON, J.D., DEGREZ, G., DICK, E. and GRUNDMANN, R., "*Computational Fluid Mechanics*", John F. Wendt (ed.), Springer-Verlag, Berlin, 1992.
4. AZIZ, K. and SETTARI, A., "*Petroleum Reservoir Simulation*", Elsevier Applied Science Publishers, 1979.
5. BALDWIN, B.S. and LOMAX, H., "*Thin layer approximation an algebraic model for separated turbulent flows*", AIAA paper 81-1269, 1981.
6. BEAM, R.M. and WARMING, R.F., "*An implicit finite-difference algorithm for hyperbolic systems in conservation-law form*", J. Comput. Phys., 22, pp. 87-110, 1976.
7. BEAM, R.M. and WARMING, R.F., "*An implicit factored scheme for the compressible Navier-Stokes equations*", AIAA J., 22, pp. 393-402, 1978.
8. BLUNT, M. and RUBIN, B., "*Implicit flux limiting schemes for petroleum reservoir simulation*", J. Comput. Phys., 102, pp. 194-210, 1992.
9. BORIS, J.P. and BOOK, D.L., "*Flux corrected transport: I. SHASTA, A fluid transport algorithm that works*", J. Comput. Phys., 11, pp. 38-69, 1973.
10. BORTOLI, A.L., "*Desenvolvimento e Extensão de uma Metodologia Aerodinâmica para Análises Aerostáticas*", Tese de Doutorado, Universidade Federal de Santa Catarina, Abril, 1995.
11. CHAKRAVARTHY, S. and OSHER, S., "*High resolution applications of the Osher upwind scheme for the Euler equations*", AIAA paper presented at 6th CFD Conference, 1983.
12. CHEN, M.H., HSU, C.C. and SHYY, W., "*Assessment of TVD schemes for inviscid and turbulent flow computation*", Int. J. Numer. Meth. Fluids, vol.12, pp. 161-177, 1991.
13. CHORIN, A.J., "*A numerical method for solving incompressible viscous flow problems*", J. Comput. Phys., vol. 2, pp. 12-26, 1967.
14. CHORIN, A.J., "*Numerical solution of the Navier-Stokes equations*", Math of Computation, vol. 22, pp. 745-762, 1971.
15. COLLELA, P. and WOODWARD, P.R., "*The piecewise parabolic method (PPM) for gas-dynamical simulations*", J. Comput. Phys., 54, pp. 174-201, 1984.

16. COURANT, R., FRIEDRICHS, K. and LEWY, H., "*Über die Partiellen Differenzengleichungen der Mathematischen Physik*", *Mathematische Annalen*, vol. 100, pp.32-74, 1928 (Traduzido para o inglês como: "*On partial difference equations of mathematical physics*", *IBM Journal of Research and Development*, vol. 11, pp. 215-237, 1967).
17. COURANT, R., ISAACSON, E. and REES, M., "*On the solution of nonlinear hyperbolic differential equations by finite differences*", *Comm. Pure Appl. Math.*, vol. 5, pp. 243-255, 1952.
18. DARWISH, M.S., "*A new high-resolution scheme based on the normalized variable formulation*", *Numer. Heat Transfer, Part B*, vol. 24, pp. 353-371, 1993.
19. DAVIS, S.F., "*TVD finite difference schemes and artificial viscosity*", *ICASE Report No.84-20*, NASA CR No. 172373, 1984.
20. DESCHAMPS, C.J., comunicação pessoal, 1995.
21. DOUGLAS, J. and RACHFORD, H.H., "*On the numerical solution of heat conduction problems in two and three space variables*", *Transaction of the American Mathematic Society*, vol. 82, pp.421-439, 1956.
22. FLUENT, *Manual do Usuário*, versão 4.3, Fluent Inc., 1993.
23. FRANKEL, S.P., "*Convergence rates of iterative treatments of partial differencial equations*", *Math Tables and others Aids of Computation*, vol. 4, pp. 65-75, 1950.
24. GASKELL, P.H. and LAU, A.K.C., "*Curvature-compensated convective transport: SMART, a new boundedness-preserving transport algorithm*", *Int. J. Numer. Meth. Fluids*, vol. 8, pp. 617-641, 1988.
25. GHIA, U., GHIA, K.N., and SHIN, C.T., "*High-Re solutions for incompressible flow using the Navier-Stokes equations and a multigrid method*", *J. Comput. Phys.*, 48, pp.387-411, 1982.
26. GODUNOV, S.K., "*Finite difference method for numerical computation of discontinuous solutions of the equation of fluid dynamics*", *Math. Sbornik*, vol.47, pp. 271-306, 1959 (em Russo) (traduzido para o inglês por US Joint Publ. Res. Service, JPRS 7226, 1969).
27. HARLOW, F.H. and WELCH, J.E., "*Numerical calculation of time-dependent viscous incompressible flow of fluid with free surface*", *Physics of Fluids*, vol. 8, pp. 2182-2189, 1965.
28. HARTEN, A., "*The artificial compression method for computation of shocks and contact discontinuities: III. Self-adjusting hybrid schemes*", *Math. of Computation*, vol. 32, No. 142, pp. 363-389, 1978.
29. HARTEN, A., "*High resolution schemes for hyperbolic conservation laws*", *J. Comput. Phys.*, 49, pp. 357-393, 1983.
30. HARTEN, A., "*On a class of high resolution total-variation-stable finite-difference schemes*", *SIAM J. Numer. Anal.*, vol. 21, pp. 1-23, 1984.
31. HARTEN, A. and HYMAN, J.M., "*Self adjusting grid methods for one-dimensional hyperbolic conservation laws*", *J. Comput. Phys.*, 50, pp. 235-269, 1983.
32. HARTEN, A., HYMAN, J.M. and LAX, P.D., "*On finite-difference aproximations and entropy conditions for shocks*", *Comm. Pure Appl. Math.*, vol. 29, pp. 297-322, 1976.

33. HARTEN, A. and LAX, P.D., "*A random choice finite difference scheme for hyperbolic conservation laws*", SIAM J. Numer. Anal., vol. 18, pp. 289-315, 1981.
34. HARTEN, A., LAX, P.D. and VAN LEER, B., "*On upstream differencing and Godunov-type schemes for hyperbolic conservation laws*", SIAM J. Numer. Anal., vol. 25, pp. 35-61, 1983.
35. HARTEN, A. and OSHER, S., "*Uniformly high-order accurate nonoscillatory schemes I*", SIAM J. Numer. Anal., vol. 24, No. 2, pp. 279-309, 1987.
36. HAYASE, T., HUMPHREY, J.A.C. and GREIF, R., "*A consistently formulated QUICK scheme for fast and stable convergence using finite-volume iterative calculation procedures*", J. Comput. Phys., 98, pp. 108-118, 1992.
37. HIRSCH, C., "*Numerical computation of internal and external flows*", Wiley-Interscience, vol. 1 e 2, 1988.
38. HWANG, J.C. and Liu, J.L., "*Locally implicit total-variation-diminishing schemes on unstructured triangular meshes*", AIAA Journal, vol. 29, No. 10, pp. 1619-1626, 1991.
39. HWANG, J.C. and YANG, S.Y., "*Locally implicit total variation diminishing schemes on mixed quadrilateral-triangular meshes*", AIAA Journal, vol. 231, No. 11, pp. 2008-2015, 1993.
40. JAMESON, A., SCHMIDT, W. and TURKEL, E., "*Numerical solution of the euler equations by finite volume methods using Runge Kutta time stepping schemes*", AIAA paper 81-1259, 1981.
41. JAMESON, A. and MAVRIPLIS, D., "*Finite volume solution of the two-dimensional Euler equations on a regular triangular mesh*", AIAA Journal, vol. 24, No. 4, 1986.
42. LAX, P.D., "*Weak solutions of nonlinear hyperbolic equations and their numerical computation*", Comm. Pure Appl. Math., vol. 7, pp. 159-193, 1954.
43. LAX, P.D., "*Hyperbolic Systems of Conservation Laws and the Mathematical Theory of Shock Waves*", Philadelphia, 1973 (SIAM Publications).
44. LAX, P. and WENDROFF, B., "*Systems of conservation laws*", Comm. Pure Appl. Math., vol. 8, pp. 217-237, 1960.
45. LEONARD, B.P., "*A stable and accurate convective modelling procedure based on quadratic upstream interpolation*", Comput. Methods Appl. Mech. Eng., vol. 19, pp. 59-98, 1979a.
46. LEONARD, B.P., "*A survey of finite differences of opinion on numerical muddling of incomprehensible defective confusion equation*", paper in ASME, Applied Mechanics Division, Winter Annual Meeting, 1979b.
47. LEONARD, B.P., "*The EULER-QUICK code in C*", Taylor and K. Morgan (eds.), Numerical Methods in Laminar and Turbulent Flows, Pineridge Press, Swansea, U.K., 1983.
48. LEONARD, B.P., "*Simple high accuracy resolution program for convective modelling of discontinuities*", Int. J. Numer. Meth. Fluids, vol. 8, pp. 1291-1318, 1988.
49. LEONARD, B.P., "*The ULTIMATE conservative difference scheme applied to unsteady one-dimensional advection*", Comput. Methods Appl. Mech. Eng., 88, pp. 17-74, 1991.
50. LeVEQUE, R.J., "*Numerical Methods for Conservation Laws*", Birkhäuser, Basel, 1990.

51. LeVEQUE, R.J. and YEE, H.C., "*A study of numerical methods for hyperbolic conservation laws with stiff source terms*", J. Comput. Phys., 86, pp.187-210, 1990.
52. LIEBMANN, L., "*Die Angenäherte Ermittlung Harmonischer Funktionen und Konformer Abbildungen, Sitzungsber.*", Math. Phys. Kl. Bayer. Akad. Wiss., vol.3, p. 385, 1918.
53. LIEN, F.S. and LESCHZINER, M.A., "*Upstream monotonic interpolation for scalar transport with application to complex turbulent flows*", Int. J. Numer. Meth. Fluids, vol 19, pp. 527-548, 1994a.
54. LIEN, F.S. and LESCHZINER, M.A., "*A General non-orthogonal collocated finite volume algorithm for turbulence flow at all speeds incorporating second-moment turbulence-transport closure*", Part 1: Computational implementation; Part 2: Application", Comput. Methods Appl. Mech. Eng., 144, pp. 123-148 / 149-167, 1994b.
55. LOBÃO, D.C., "*High resolution schemes applied to the Euler equations*", Ph.D. thesis, University of Bristol, UK, Aug., 1992.
56. LYRA, P.R.M., MORGAN, K., PERAIRE, J. and PEIRÓ, J., "*TVD algorithms for the solution of the compressible euler equations on unstructured meshes*", Int. J. Numer. Meth. Fluids, vol. 19, pp. 827-847, 1994.
57. McDONALD, P.W., "*The computation of transonic flow through two-dimensional gas turbine cascade*", ASME paper 71-GT-89, 1971.
58. MALISKA, C.R., "*A Solution Method for Three-Dimensional Parabolic Fluid Flow Problems in Nonorthogonal Coordinates*", PhD. Thesis, University of Waterloo, Waterloo, Canadá, 1981.
59. MALISKA, C.R., "*Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computational*", Livro Técnico-Científico S.A, Rio de Janeiro, 1995.
60. MARCHI, C.H., "*Esquemas de alta ordem para solução de escoamentos de fluidos sem dispersão numérica*", RBCM - Revista Brasileira de Ciências Mecânicas, vol. XV, No. 3, pp. 231-249, 1993.
61. MARCHI, C.H., comunicação pessoal, 1995.
62. MARCHI, C.H. and MALISKA, C.R., "*A nonorthogonal finite-volume method for the solution of all speed flows using co-located variables*", Numerical Heat Transfer, Part B, vol. 26, pp. 293-311, 1994.
63. MONTAGNÉ, J.L., YEE, H.C. and VINOKUR, M., "*Comparative study of high resolution shock-capturing schemes for a real gas*", AIAA Journal, vol. 27, No. 27, pp. 1332-1346, 1989.
64. MOTA, M.A.A., "*Simulação numérica de reservatórios de petróleo utilizando coordenadas generalizadas e esquema de interpolação TVD*", Dissertação de Mestrado, Universidade Federal de Santa Catarina, Santa Catarina, Set., 1994.
65. MOTA, M.A.A. e MALISKA, C.R., "*Simulação numérica de reservatórios de petróleo utilizando coordenadas generalizadas e interpolação TVD*", Anais V ENCIT, pp. 325-328, São Paulo, Brasil, 1994.
66. OSHER, S. and CHAKRAVARTHY, S., "*High resolution schemes and entropy condition*", SIAM J. Numer. Anal., vol. 21, pp. 955-984, 1984.

67. OSHER, S. and CHAKRAVARTHY, S., IMA Vol. Math. Appl., vol. 2, pp. 229, Springer-Verlag, New York/Berlin, 1986.
68. PATANKAR, S.V., *"Numerical Heat Transfer and Fluid Flow"*, Hemisphere Publishing Corporation, 1980.
69. PATANKAR, S.V. and SPALDING, D.B., *"A calculation procedure for heat, mass and momentum transfer in three-dimensional parabolic flows"*, Int. J. Heat Mass Transfer, vol. 15, pp. 1787-1806, 1972.
70. PEACEMAN, D.W. and RACHFORD, H.H., Jr., *"Numerical solution of parabolic and elliptic differential equations"*, J. Soc. Indust. Applied Mathematics, vol. 3, No. 1, March, pp. 28-41, 1955.
71. PETERS, S., *"Bifurcação e Oscilações Auto-Induzidas em Escoamentos de Fluidos em Difusores Radiais"*, Tese de Doutorado, UFSC, Santa Catarina, Set., 1994.
72. PRAKASH, C. and PATANKAR, S.V., *"A control volume-based finite element method for solving the Navier-Stokes equations using equal-order velocity-pressure interpolation"*, Numerical Heat Transfer, vol. 9, pp. 253-276, 1986.
73. RAITHBY, G.D., *"Prediction of dispersion by surface discharge"*, Basin Investigation and Modelling Section - Canada Centre for Inland Waters, Canadá 1976.
74. RAITHBY, G.D. and TORRANCE, K.E., *"Upstream-weighted differencing schemes and their application to elliptic problems involving fluid flow"*, Computers and Fluids, vol. 2, pp. 191-206, 1974.
75. RHIE, C.M. and CHOW, W.L., *"A numerical study of the flow of the turbulent flow past an isolated airfoil with trailing edge separation"*, AIAA Journal, vol. 21, pp. 1525-1532, 1983.
76. RICHARDSON, L.F., *"The approximate arithmetical solution by finite differences of physical problems involving differential equations, with an application to the stresses in a Masonry Dam"*, Transactions of the Royal Society of London, Ser. A., vol. 210, pp. 307-357, 1910.
77. RICHMEYER, R.D. and MORTON, K.W., *"Difference Methods for Initial Value Problems"*, Interscience Publishers, New York, 1967.
78. ROACHE, P.J., *"Computational Fluid Dynamics"*, Hermosa Publishers, 1976.
79. ROE, P.L., *"Approximate Riemann solvers, parameter vectors, and difference schemes"*, J. Comput. Phys., 43, pp. 357-372, 1981a.
80. ROE, P.L., *"Numerical algorithms for the linear wave equation"*, Royal Aircraft Establishment, Technical Report 81047, 1981b.
81. ROE, P.L., *"Generalized formulation of TVD Lax-Wendroff schemes"*, ICASE Report No. 84-53, NASA CR No. 172478, 1984.
82. ROE, P.L., *"Some contributions to the modelling of discontinuous flows"*, Proc. AMS-SIAM Summer Seminar on Large-Scale Computation in Fluid Mechanics, the American Mathematical Society, Providence, RI, vol. 2, pp. 163-194, 1985, 27 June-8 July 1983, Lectures in Applied Mathematics, vol. 22, 1985.
83. RUBIN, B. and BLUNT, M., *"Higher-order implicit flux limiting schemes for Black-Oil simulation"*, SPE paper 21222, 1992.

- 84.SCHNEIDER, G.E. and RAW, M.J., "*A skewed, positive influence coefficient upwinding procedure for control-volume-based finite-element convection-diffusion computation*", Numerical Heat Transfer, vol. 9, pp. 1-26, 1986.
- 85.SCOLA, L.A., comunicação pessoal, 1995.
- 86.SILVA, A.F.C., "*Um Procedimento em Volumes Finitos Para a Solução de Escoamentos de Qualquer Velocidade*", Tese de Doutorado, Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, 1991).
- 87.SILVA, A.F.C. and MALISKA, C.R., "*Uma formulação segregada em volumes finitos para escoamentos compressíveis ou incompressíveis em coordenadas generalizadas*", 2º ENCIT, pp. 11-14, Aguas de Lindóia-SP, Brasil, 1988.
- 88.SHU, C.W. and OSHER, S., "*Efficient implementation of essentially non-oscillatory shock-capturing schemes*". J. Comput. Phys., vol. 77, pp. 439-471, 1988.
- 89.SOD, G.A., "*Numerical Methods in Fluid Dynamics: Initial and Initial Boundary-Value Problems*", Cambridge University Press, Cambridge, 1985.
- 90.SOUTHWELL, R.V., "*Relaxation Methods in Theoretical Physics*", Oxford University Press, New York NY, 1946.
- 91.SWEBY, P.K., "*High resolution schemes using flux limiter for hyperbolic conservation laws*", SIAM J. Numer. Anal., vol. 21, pp. 995-1011, 1984.
- 92.SWEBY, P.K., "*High resolution TVD schemes using flux limiter*", Lectures in Applied Mathematics, vol. 22, pp. 289-308, 1985.
- 93.SWEBY, P.K. and BAINES, M.J., "*On convergence of Roe's scheme for the general non-linear scalar wave equation*", J. Comput. Phys., 56, pp. 135-148, 1984.
- 94.TAKAKURA, Y., ISHIGURO, T. and OGAWA, S., "*On TVD difference schemes for the three-dimensional Euler equation in general co-ordinates*", Int. J. Numer. Meth. Fluids, vol. 9, pp. 1011-1024, 1989.
- 95.TAMAMDIS, P. and ASSANIS, D.N., "*Evaluation of various high-order-accuracy schemes with and without flux limiters*", Int. J. Numer. Meth. Fluids, vol. 16, pp. 931-948, 1993.
- 96.THAKUR, S. and SHYY, W., "*Development of high-accuracy convection schemes for sequential solvers*", Numer. Heat Transfer, Part B, vol. 23, pp. 175-199, 1993.
- 97.THOM, A., "*The flow past circular cylinders at low speeds*", Proceedings of the Royal Society of London, A141, pp. 651-666, 1933. *
- 98.THOMPSON, J.F., WARSI, Z.U.A. and MASTIN, C.W., "*Numerical Grid Generation*", Elsevier Science Publishing Co. Inc., 1985.
- 99.VAN DOORMAAL, J.P. and RAITHEY, G.D., "*Enhancements of the SIMPLE method for predicting incompressible fluid flows*", Numer. Heat Transfer, vol. 7, pp. 147-163, 1984.
- 100.VAN LEER, B., in "*Lecture Notes in Physics*", No. 18", pp.163, Springer-Verlag, Berlin, 1973.
- 101.VAN LEER, B., "*Towards the ultimate conservative difference scheme II. Monotonicity and conservation combined in a second-order scheme*", J. Comput. Phys., vol. 14, pp. 361-370, 1974.

102. VAN LEER, B., "*Towards the ultimate conservative difference scheme III. Upstream-centered finite-difference schemes for ideal compressible flow*", J. Comput. Phys., vol. 23, pp. 263-275, 1977a.
103. VAN LEER, B., "*Towards the ultimate conservative difference scheme IV. A new approach to numerical convection*", J. Comput. Phys., vol. 23, pp. 276-299, 1977b.
104. VAN LEER, B., "*Towards the ultimate conservative difference scheme. V. A second-order sequel to Godunov's method*", J. Comput. Phys., 32, pp. 101-136, 1979.
105. VON NEUMANN, J. and RICHTMYER, R.D., "*A method for numerical calculation of hydrodynamic shocks*", J. Applied Phys., vol. 21, pp. 232-237, 1950.
106. WARMING, R.F. and BEAM, R.M., "*Upwind second-order difference schemes and applications in aerodynamic flows*", AIAA J., vol 14, pp. 1241-1249, 1976.
107. YEE, H.C., "*On the Implementation of a Class of Upwind Schemes for System of Hyperbolic Conservation Laws*", NASA TM-86839, Set. 1985.
108. YEE, H.C., "*Upwind and Symmetric Shock Capturing Schemes*", NASA TM-89464, May 1987a.
109. YEE, H.C., "*Construction of explicit and implicit symmetric TVD schemes and their applications*", J. Comput. Phys., 68, pp. 151-179, 1987b.
110. YEE, H.C., BEAM, R.M. and WARMING, R.F., "*Boundary approximations for implicit schemes for one-dimensional inviscid equations of gasdynamics*", AIAA Journal, vol. 20, No. 9, pp. 1203-1211, 1982.
111. YEE, H.C., HARTEN, A., "*Implicit TVD schemes for hyperbolic conservation laws in curvilinear coordinates*", AIAA Journal, vol. 25, No. 2, pp. 266-274, 1987.
112. YEE, H.C. and SHINN, J.L., "*Semi-implicit and fully implicit shock-capturing methods for non-equilibrium flows*", AIAA Journal, vol. 27, No. 3, pp. 299-307, 1989.
113. YEE, H.C., WARMING, R.F. and HARTEN, A., "*Implicit total variation diminishing (TVD) schemes for steady-state calculations*", J. Comput. Phys., 57, pp. 327-360, 1985.
114. YOUNG, D., "*Iterative methods for solving partial difference equations of elliptic type*", Transactions of the American Mathematic Society, vol. 76, pp. 92-111, 1954.
115. ZALESAK, S.T., "*Fully Multidimensional flux-corrected transport algorithms for fluids*", J. Comput. Phys., 31, pp. 335-362, 1979.